



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR

TESIS DOCTORAL EN INGENIERÍA QUÍMICA

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD GLOBAL, MODELADO Y
OPTIMIZACIÓN DE SISTEMAS DE REACCIÓN BIOLÓGICOS

María Paz Ochoa

BAHIA BLANCA

ARGENTINA

2017

A mi abuela Coty

PREFACIO

Esta tesis se presenta como parte de los requisitos para optar al grado Académico de *Doctora en Ingeniería Química*, de la Universidad Nacional del Sur y no ha sido presentada previamente para la obtención de otro título en esta Universidad u otra. La misma contiene los resultados obtenidos en investigaciones llevadas a cabo en la *Planta Piloto de Ingeniería Química*, dependiente del Departamento de *Ingeniería Química* durante el período comprendido entre el 1/04/2012 y el 16/02/2017, bajo la dirección de la *Dra. Patricia M. Hoch*, *Investigadora Adjunta de CONICET* y *Profesora Adjunta* del *Departamento de Ingeniería Química*.

Departamento de Ingeniería Química

UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR



UNIVERSIDAD NACIONAL DEL SUR
Secretaría General de Posgrado y Educación Continua

La presente tesis ha sido aprobada el/...../.....,
mereciendo la calificación de

AGRADECIMIENTOS

Ante todo, agradezco al estado de la Nación Argentina por permitirme acceder a una formación doctoral mediante el Consejo Nacional de Investigaciones Científicas y Tecnológicas. Y especialmente a la Planta Piloto de Ingeniería Química y a la Universidad Nacional del Sur, donde llevé a cabo las tareas de investigación y los cursos de posgrado, por brindarme los medios necesarios para realizar mi Tesis.

A mi directora, la Dra. Patricia Hoch por aceptar dirigirme y por brindarme sus conocimientos a lo largo de estos años. También por darme siempre su confianza y sus ingeniosos puntos de vista.

A la Dra. Vanina Estrada por guiarme en los aspectos biológicos del modelado durante estos años, por su disposición total y calidez humana. A la Dra. Jimena Di Maggio también por sus incontables colaboraciones.

A Nora Pascual por estar en todos los detalles.

A las Dras. Adriana Brandolin y Lidia Quinzani por darnos la bienvenida al Instituto hace ya cinco años. En relación a los cursos de posgrado, agradezco a todos los docentes por brindarnos sus conocimientos con paciencia y dedicación, especialmente al Dr. Alberto Bandoni por transmitirnos su pasión por la ingeniería de procesos, al Dr. Daniel Borio por inculcarnos la importancia del sentido físico de los procesos, y al Dr. Marcelo Zabaloy por las mejores clases que he tomado.

A mis compañeros de doctorado Pipi, Mari, Fer, Yane, Romi, Clau, Flor, Carla, Vivi, Anibal, Yami, Chipi y Mechi, y también a Sandro y Seba por los momentos compartidos.

A mis amigas de la universidad Yami, Meli, Vero, Nata, Ana, Vicky y Estefi.

A mis amigos Juli y Ary, por llevar juntos a la práctica los conceptos teóricos de los procesos biotecnológicos.

A mis amigas del colegio Jose, Dolo, Aye y Agus que más que amigas son mis hermanas.

A mis hermanos Flor, Poli y José, y a mi papá, que los amo y siempre me apoyan.

A mi mamá por todo, que la amo y siempre está.

Y finalmente a Parce, mi compañero de la vida, por su confianza, su apoyo y su amor incondicional.

RESUMEN

En esta Tesis se presentan metodologías que incluyen análisis de sensibilidad global, modelado y optimización dinámica, para el estudio de procesos que se llevan a cabo en sistemas de reacción biológicos, tales como biorreactores para la obtención de etanol y lagunas de tratamiento biológico de aguas residuales. Para ello se utilizan modelos cinéticos fuertemente integrados y dinámicos, de creciente complejidad, representados por sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas. Los modelos cinéticos presentan un elevado número de parámetros que están involucrados en funciones altamente no lineales. Dichos parámetros tienen asociada incertidumbre que resulta, por ejemplo, de errores de medición y pueden influenciar los valores de las variables de estado. Por esta razón, es importante identificar los parámetros a los que las variables de estado son más sensibles, mediante análisis de sensibilidad. Se propone la implementación del análisis de sensibilidad global, basado en la descomposición de la varianza, aplicado a modelos dinámicos de biorreactores para la producción de bioetanol y del sistema de lagunas de estabilización. Este análisis se basa en la metodología propuesta por Sobol' y permite obtener perfiles temporales de índices de sensibilidad de primer orden, total y de interacción entre parámetros, lo cual es útil para comprender complejas relaciones entre los parámetros y las variables del modelo. Además, se analizan diferentes estimadores de la varianza condicional, siendo el de Jansen el más adecuado para modelos más complejos proporcionando mejores resultados. La finalidad del estudio es determinar cuáles son los parámetros más importantes y que deben ser estimados con mayor precisión en forma experimental, para tener un modelo ajustado que pueda proveer predicciones confiables ante cambios en las condiciones de operación, tanto en sistemas de biorreactores de producción de etanol como de lagunas de estabilización.

Posteriormente, se procede al diseño óptimo de un sistema de lagunas de estabilización para el tratamiento de aguas residuales. El desempeño de estos sistemas es comparable al de los barros activados, aunque el requerimiento de espacio es una condición limitante para su empleo. El diseño se realiza planteando un problema de programación mixto entera no lineal sobre una superestructura que considera tres tipos de lagunas (aeróbica, facultativa y anaeróbica) con la posibilidad de reciclo, lo que permite obtener la configuración óptima para cumplir con el objetivo de minimizar los costos del sistema con la restricción de que la carga orgánica del efluente sea inferior al valor establecido por las regulaciones ambientales.

Finalmente, se implementan estrategias de manejo de las lagunas de tratamiento como problemas de optimización dinámica, donde se proponen como variables de control el agregado de nutrientes, esenciales para el desarrollo de los procesos biológicos, y la potencia que se debe proporcionar a los aireadores para asegurar una oxigenación dentro de las lagunas.

ABSTRACT

In this Thesis, several methodologies that include global sensitivity analysis, modeling and dynamic optimization are presented to deepen the knowledge on processes which take place in biologic reaction systems, such as bioreactors for ethanol production and wastewater treatment ponds. These models are based on dynamic and highly integrated kinetic models based on first principles, which are represented by differential algebraic equations systems. Kinetic models have a large number of parameters embedded in nonlinear functions. These parameters may have a certain degree of uncertainty due, for example, to measurement errors, and can influence the values of the state variables. Sensitivity analysis provides a mean to detect and rank the importance of parameters in a model. In particular, global sensitivity analysis is applied to a dynamic model, based on the variance decomposition using Sobol's method. This allows the calculation of first order, total and interaction indices for each parameter, which are useful to understand complex relationships between parameters. Several variance estimators are considered, being Jansen's the most appropriate for complex models, yielding the best results. As a result of this study, parameters can be ranked by importance and then experiments can be designed to find with the best precision those parameters that produce the largest impact on the prediction of state variables of the model.

Furthermore, the design of stabilization ponds systems for wastewater treatment is addressed through the formulation of a mixed integer nonlinear programming problem over a supestructure which considers three types of lagoons (aerobic, anaerobic and facultative), including recycle streams. The objective function is total cost minimization, subject to constraints on the maximum legally allowed organic load.

Finally, several strategies are proposed for the management of stabilization pond systems within a dynamic optimization environment, where the control variables are nutrient

addition rate along the time horizon and aerators power for a suitable oxygen concentration, where required.

ÍNDICE

PREFACIO	i
AGRADECIMIENTOS.....	iii
RESUMEN	v
ABSTRACT	vii
Lista de Figuras	xi
Lista de Tablas.....	xvi
Capítulo 1 Introducción.....	1
1.1 Disponibilidad de Agua Dulce a Nivel Mundial.....	2
1.2 Procesos Biológicos de Tratamiento de Agua: Lagunas de Estabilización	5
1.3 Producción de Bioetanol	8
1.4 Objetivos de la Tesis.....	11
1.5 Estructura de la Tesis	12
Publicaciones y Congresos	15
Capítulo 2 Modelado, Análisis de Sensibilidad Global y Optimización de Procesos Dinámicos	19
2.1 Modelado de Sistemas Dinámicos	19
2.2 Análisis de Sensibilidad Global de Sistemas Dinámicos.....	21
2.3 Optimización de Procesos Dinámicos	31
Capítulo 3 Análisis de Sensibilidad Global en Sistemas Dinámicos para la Producción de Bioetanol	39
3.1 Introducción	39
3.2 Modelado de Biorreactores y Redes de Biorreactores para la Producción de Bioetanol.....	42
3.3 Análisis de Sensibilidad Global en Biorreactores y Redes de Biorreactores: Resultados Numéricos	56
3.3.1 Concentración de Sustrato.....	58
3.3.2 Conversión de Glucosa y Xilosa.....	63
3.3.3 Concentración de Biomasa.....	65
3.3.4 Concentración de Bioetanol.....	69
3.4 Conclusiones.....	74
Capítulo 4 Modelado de Sistemas de Lagunas de Tratamiento Biológico de Aguas Residuales	77
4.1 Introducción	77
4.2 Modelo Dinámico	79
4.3 Resultados Numéricos	93

4.4 Conclusiones	97
Capítulo 5 Análisis de Sensibilidad Global en Modelos Dinámicos de Sistemas de Lagunas de Estabilización	99
5.1 Introducción	99
5.2 Estimadores de los índices de sensibilidad global	101
5.3 Análisis de Sensibilidad en un Sistema de Lagunas de Estabilización.....	104
5.4 Resultados Numéricos	105
5.4.1 Priorización de Factores.....	108
5.4.2 Laguna Aeróbica 1.....	113
5.4.3 Laguna Aeróbica 2.....	117
5.4.4 Capa Superior de la Laguna Facultativa.....	119
5.4.5 Capa Inferior de la Laguna Facultativa.....	121
5.5 Conclusiones	123
Capítulo 6: Diseño Óptimo de Sistemas de Tratamiento Biológico de Aguas Residuales	125
6.1 Introducción	125
6.2 Modelo del Sistema.....	129
6.3 Modelo Económico.....	131
6.4 Resultados Numéricos	132
6.5 Conclusiones	134
Capítulo 7 Manejo de Lagunas de Estabilización	137
7.1 Introducción	137
7.2 Caso de Estudio	141
7.3 Modelo de Lagunas.....	143
7.4 Variables de control de Lagunas.....	144
7.5 Formulación de un Problema de Control Óptimo.....	147
7.6 Resultados y Discusiones.....	149
7.7 Conclusiones	156
Capítulo 8 Conclusiones y Trabajos Futuros	159
8.1 Contribuciones y Conclusiones.....	159
8.2 Trabajos Futuros	163
Referencias	159
Glosario	177
Anexo 1: Índices de sensibilidad global para el modelo dinámico de un sistema de lagunas de estabilización	181
Anexo 2: Comparación Modelos de Lagunas de Estabilización	201

LISTA DE FIGURAS

Capítulo 1

Figura 1. Distribución de agua en el mundo.....	2
---	---

Capítulo 2

Figura 2. Representación gráfica de los diferentes tipos de índice de sensibilidad.....	30
Figura 3. Esquema del enfoque CVP.....	35
Figura 4. Parametrización del vector de variables de control: (a) único disparo y (b) múltiples disparos.....	36

Capítulo 3

Figura 5. Esquema del fermentador del Modelo (i).....	44
Figura 6. Perfiles de concentración de Sustrato y Biomasa para el Modelo (i) evaluado con los valores nominales de los parámetros.....	45
Figura 7. Perfil de concentración de Producto del Modelo (i), evaluado con los valores nominales de los parámetros	46
Figura 8. Esquema de la red de biorreactores del Modelo (ii).	46
Figura 9. Perfiles de concentración de Sustrato y Biomasa del Modelo (ii) evaluados con los valores nominales de los parámetros	49
Figura 10. Perfil de la concentración de Producto del Modelo (ii) evaluados con los valores nominales de los parámetros.....	49
Figura 11. Esquema del co-fermentador del Modelo (iii)	52
Figura 12. Perfiles de concentración de los sustratos Glucosa (S_g) y Xilosa (S_x) del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.....	53
Figura 13. Perfiles de concentración de la conversión de Glucosa (χ_g) y Xilosa (χ_x) del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.	54
Figura 14. Perfiles de concentración de Biomasa del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.....	54
Figura 15. Perfiles de la concentración de la concentración del Producto obtenido a partir de glucosa (P_g) y de xilosa (P_x) del Modelo (iii) evaluados con los valores nominales de los parámetros.....	55

Figura 16. (a) Perfiles promedio de la concentración de Sustrato evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de sustratos en modelo (i): fermentador.	59
Figura 17. (a) Perfiles promedio de la concentración de Sustrato evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de Sustratos en modelo (ii): red de biorreactores.	60
Figura 18. Perfiles promedio de la concentración de los sustratos Glucosa (S_g) y Xilosa (S_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$).	62
Figura 19. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de (a) glucosa y (b) xilosa del modelo (iii): cofermentador.	62
Figura 20. Perfiles promedio de la concentración de la conversión de Glucosa (χ_g) y Xilosa (χ_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$).	64
Figura 21. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden la conversión de (a) glucosa y (b) xilosa del cofermentador.	64
Figura 22. (a) Perfiles promedio de la concentración de Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración biomasa en modelo (i): fermentador.	66
Figura 23. (a) Perfiles promedio de la concentración Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración Biomasa en modelo (ii): red de biorreactores. ...	67
Figura 24. (a) Perfiles promedio de la concentración de Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración biomasa en modelo (iii): cofermentador.	68
Figura 25. (a) Perfiles promedio de la concentración de Producto evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 50, 100, 200, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto en modelo (i): fermentador.	70
Figura 26. (a) Perfiles promedio de la concentración de Producto evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700, \text{ y } 1250$) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto en modelo (ii): red de biorreactores.	71

Figura 27. Perfiles promedio de la concentración de la concentración del Producto obtenido a partir de glucosa (P_g) y de xilosa (P_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250).	72
Figura 28. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto (a) a partir de glucosa y (b) de xilosa del modelo (iii): cofermentador.....	73

Capítulo 4

Figura 29. Configuración (a) (actual) adoptada en una empresa juguera del país y (b) convencional para el sistema de lagunas.	78
Figura 30. Esquema del modelo de la laguna facultativa.	79
Figura 31. Concentración total de DQO.	94
Figura 32. Concentración de materia orgánica particulada inerte (C_{XI}).	94
Figura 33. Concentración de materia orgánica soluble inerte (C_{SI}).	95
Figura 34. Concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}).	95
Figura 35. Concentración de sustrato particulado lentamente biodegradable (C_{XS}).	96
Figura 36. Concentración de sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}).	96

Capítulo 5

Figura 37. Resultados del análisis de sensibilidad local: La frecuencia de la influencia de los parámetros sobre todas las variables diferenciales. Los parámetros cuya frecuencia es nula no se representan.....	106
Figura 38. Valores máximo ($S_{y,i}^{\max}$), mínimo ($S_{y,i}^{\min}$) y promedio en el tiempo ($\bar{S}_{y,i}$) del índice de sensibilidad de primer orden para el coeficiente en la función de limitación por temperatura (θ) en la primera (a) y segunda (b) laguna aeróbica. Y en la capa superior (c) e inferior (d) de la laguna facultativa también se muestra el valor promedio en el tiempo $\bar{S}_{y,i}$ del coeficiente de transferencia de masa entre capas (k_m).	109
Figura 39. Visualización de la relevancia de los parámetros del modelo.....	111
Figura 40. Laguna Aeróbica 1: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) y del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (c y d); y perfiles de sensibilidad de interacción para la concentración de nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).	115

Figura 41. Laguna aeróbica 1: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para las bacteria autotróficas (C_{ab}) (a y b) y heterotróficas (C_{hb}) (c y d)...	116
Figura 42. Laguna Aeróbica 2: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) y del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (c y d); y perfiles de sensibilidad de interacción para la concentración del nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).	118
Figura 43. Capa superior de la laguna facultativa: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) de nitrógeno gaseoso (C_{N2}) (c y d); perfiles del índice de sensibilidad de interacción para la concentración del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (e) y del nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (f).....	120
Figura 44. Capa inferior de la laguna facultativa: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de nitrógeno gaseoso (C_{N2}) (a y b) y de nitrato (c and d) (C_{NO3}); y perfil del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).	122

Capítulo 6

Figura 45. Disposición espacial del sistema de lagunas de estabilización.	129
Figura 46. Configuración óptima y las principales variables del proceso para el escenario base: caudales volumétricos: Q_{in} , Q_R , and Q_F (m^3/d); concentración de materia orgánica inicial, DQO_{in} , y final, DQO_f ($gDQO/m^3$), profundidad de la laguna: h (m) y área de la laguna: A (m^2).....	134

Capítulo 7

Figura 47. Valor de la función objetivo S/C: sin control, A: aireación, B: dosificación de gránulos NP, C: dosificación de urea y ABC: las tres estrategias de control en simultáneo para un intervalo de control de 30 días. ABC 15, ABC 5 y ABC 1 representan las tres estrategias en simultáneo para un intervalo de control de 15, 5 y 1, días respectivamente (únicamente aplicadas a la primera laguna aireada del sistema).	150
Figura 48. Perfiles de la concentración de demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO), y potencia del motor (P_{mot}) manipulando la aireación únicamente (estrategia A) con intervalos de control de 30 días.	151

Figura 49. Control por dosificación de gránulos de NP (estrategia B) con intervalos de 30 días: Arriba: Perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO). Abajo: Perfil de velocidad de dosificación de gránulos de Nitrógeno-Fósforo.	152
Figura 50. Aplicación de las tres estrategias de control (ABC) con intervalo de control de 30 días. Arriba: perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO), y de la potencia del motor (P_{mot}). Abajo: perfil de la velocidad de dosificación de amonio (R_{NH_4}) y gránulos de Nitrógeno-Fósforo (R_{NP}).	153
Figura 51. Perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}), y final en el caso sin control (S/C) y aplicando las tres estrategias de control simultáneamente para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).	154
Figura 52. Perfil de la potencia del motor considerando aireación únicamente (A30) y las tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).	154
Figura 53. Perfil de dosificación de gránulos de NP considerando la dosificación únicamente (B 30) y las tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).	155
Figura 54. Perfil de dosificación urea: tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0)	155

LISTA DE TABLAS

Capítulo 2

Tabla 1. Pasos para calcular los índices de sensibilidad.....	29
Tabla 2. Influencia de los parámetros basada en los valores de sus índices.....	30

Capítulo 3

Tabla 3. Descripción de los parámetros del modelo del fermentador.	45
Tabla 4. Descripción de los parámetros del Modelo (ii), que representa una red de biorreactores.	48
Tabla 5. Descripción de los parámetros del modelo de Co-fermentación.....	53
Tabla 6. Parámetros inciertos de los modelos cinéticos.	57
Tabla 7. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de sustrato (S).....	63
Tabla 8. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de biomasa (X).....	69
Tabla 9. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de producto (P).....	74

Capítulo 4

Tabla 10. Variables diferenciales del modelo del sistema de lagunas de estabilización.	81
Tabla 11. Procesos principales de las distintas lagunas.....	84
Tabla 12. Descripción y expresiones de los procesos cinéticos.	85
Tabla 13. Parámetros del modelo del sistema de lagunas de estabilización.....	88
Tabla 14. Parámetros dimensionales de las Lagunas.	90
Tabla 15. Términos de generación y consumo en el balance de masa.	91

Capítulo 5

Tabla 16. Fórmulas para el cálculo de S_i y S_i^{TOT} para la variable de salida y en cada instante de tiempo t	102
Tabla 17. Parámetros inciertos del modelo	108

Capítulo 6

Tabla 18. Concentración de la corriente de entrada a la planta de tratamiento de aguas residuales.	133
Tabla 19. Costos del sistema (USD).....	134

Anexo 1

Tabla A.1.1. Valores máximos (S^{\max}), mínimos (S^{\min}) y promediados en el tiempo (\bar{S}) de los índices de sensibilidad global de primer orden para el modelo de lagunas de estabilización. LA1: 1 ^{ra} Laguna Aeróbica, LA2: 2 ^{da} Laguna Aeróbica, CSLF: Capa Superior Laguna Facultativa, CILF: Capa Inferior Laguna Facultativa.....	181
Tabla A.1.2. Valores máximos (S^{\max}), mínimos (S^{\min}) y promediados en el tiempo (\bar{S}) de los índices de sensibilidad global de interacción del modelo de lagunas de estabilización. LA1: 1 ^{ra} Laguna Aeróbica, LA2: 2 ^{da} Laguna Aeróbica, CSLF: Capa Superior Laguna Facultativa, CILF: Capa Inferior Laguna Facultativa.	191

Anexo 2

Tabla A.2.1. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Procesos relacionados con el crecimiento de Fitoplancton.....	201
Tabla A.2.2. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Funciones de limitación del crecimiento de Fitoplancton.	202
Tabla A.2.3. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Procesos relacionados con los distintos tipos de Bacteria.	203
Tabla A.2.4. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Funciones de limitación del crecimiento de los distintos tipos de Bacteria.	204
Tabla A.2.5. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Procesos relacionados con los distintos tipos de Materia Orgánica.	205
Tabla A.2.6. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Procesos relacionados con el Oxígeno Disuelto.....	206
Tabla A.2.7. Comparación <i>Modelos I y II</i> – Procesos relacionados con los distintos tipos de Nutrientes.....	207

INTRODUCCIÓN

El modelado matemático de sistemas biológicos constituye una poderosa herramienta para el estudio y el conocimiento de los complejos procesos que se llevan a cabo en biorreactores y redes de biorreactores. El uso de modelos teóricos para describir y predecir el comportamiento de los sistemas biológicos es especialmente útil en cuestiones a gran escala donde el control de los experimentos es difícil y a veces imposible, o cuyas consecuencias impliquen un gran impacto en las condiciones ambientales. Incluso en situaciones donde se dispone de datos experimentales, el modelado matemático puede validar teorías existentes o proporcionar nuevos puntos de vistas. Específicamente el modelado puede utilizarse para: predecir comportamientos desconocidos basados en determinados factores, generar experimentos virtuales que cumplan con la teoría general biológica, tener en cuenta el comportamiento observado de la forma más simple posible, comparar hipótesis contrapuestas, evaluar una regla o hipótesis, sugerir conjeturas o nuevas hipótesis, o guiar investigaciones empíricas.

En síntesis, el modelado ayuda a evaluar las distintas situaciones que pueden surgir. El lenguaje matemático provee descripciones compactas de ideas complejas y es capaz de ofrecer un entendimiento de los procesos biológicos, teniendo en cuenta todos los factores que participan y su relativa importancia (Brauer & Kribs, 2016).

En la presente tesis realizan aportes para profundizar el conocimiento en sistemas de lagunas de tratamiento biológico de aguas residuales. Asimismo, se lleva a cabo análisis de sensibilidad sobre sistemas de biorreactores para la producción de etanol.

1.1 Disponibilidad de Agua Dulce a Nivel Mundial

El acceso y provisión de agua dulce constituye uno de los desafíos más importantes en la actualidad. El agua es esencial no solo para el consumo humano y de los seres vivos, sino también el desarrollo de la industria, agricultura, ganadería, energía, entre otros.

Según el UNEP (2002), la cantidad total de agua en la Tierra es aproximadamente 1400 MMkm³. Acerca de 97.5% de esta cantidad es agua salada y solo el 2.5% o aproximadamente 35 MMkm³ es de agua dulce. La mayor parte del agua dulce (alrededor del 69%) se encuentra presente en forma de hielo y de nieves permanente en la Antártida, el Ártico y en las regiones montañosas. Alrededor del 30% existe como agua dulce subterránea. Y solo el 0.4% de la cantidad total de agua dulce en la Tierra se concentra en lagos, ríos, humedad del suelo y cuencas de aguas subterráneas relativamente poco profundas, de donde se puede acceder a este recurso para satisfacer las necesidades de las poblaciones.

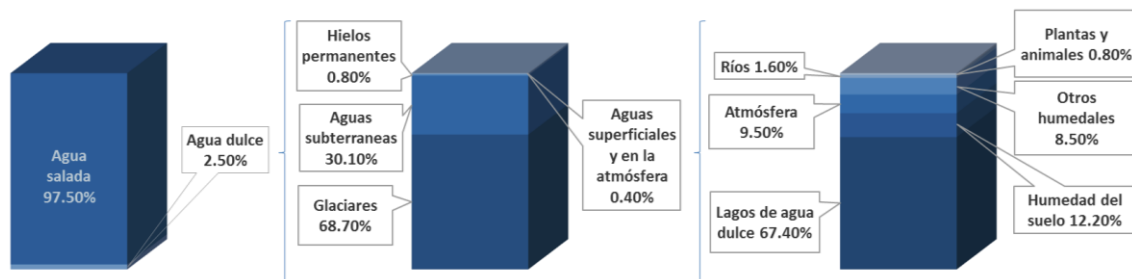


Figura 1. Distribución de agua en el mundo. Basado en datos de Babkin y Klige (2003).

Actualmente, cerca de una tercera parte de la población del planeta vive en países que sufren estrés hídrico entre moderado y alto, es decir donde el consumo de agua es superior al 10 % de los recursos renovables de agua dulce. Los tres principales factores que causaron un aumento en la demanda de agua durante el siglo pasado fueron el crecimiento demográfico, el desarrollo industrial y la expansión de la agricultura de irrigación para producir alimentos. Además, la degradación marina y costera se produce por la creciente presión sobre los recursos naturales, tanto terrestres como marítimos, y sobre el uso de

los océanos como depósitos de desechos. Entre otras causas, el aumento del turismo en las zonas costeras resulta ser perjudicial para los ecosistemas marinos.

En el plano mundial, las aguas residuales siguen siendo la mayor fuente de contaminación, por volumen, de los ambientes marinos y costeros, en tanto que las descargas costeras de estas aguas han aumentado en los últimos treinta años. Una de las tendencias que no había sido prevista hace tres décadas, es la eutrofización marina y costera derivada de la elevada descarga de nitrógeno. Como consecuencia, la degradación ambiental marina y costera no solo continúa, sino que se ha intensificado.

Además, a partir de que se descubrió una estrecha relación entre la calidad de las aguas y enfermedades como el cólera, la fiebre tifoidea y la leptospirosis, la administración de los sistemas acuáticos ha debido ser modificada de modo de minimizar los efectos de la contaminación y tales enfermedades.

A partir de estas premisas surgen los dos motivos fundamentales para el tratamiento de aguas residuales: prevenir la contaminación, protegiendo así el medio ambiente, y principalmente proteger la salud pública, salvaguardando los suministros de agua y minimizando la propagación de enfermedades transmitidas por el agua.

Los procesos de tratamiento de aguas residuales se llevan a cabo en 5 etapas, que se mencionan a continuación junto con sus principales funciones y los principales ejemplos (Ramalho, 1990).

Tratamiento preliminar (remoción y desintegración de los sólidos de mayor tamaño).

Tratamiento primario (remoción de sólidos sedimentables):

- Cribado o desbrozo
- Sedimentación
- Flotación
- Separación de aceites
- Homogeneización
- Neutralización

Introducción

Tratamiento secundario o biológico: (principalmente oxidación de la carga orgánica disuelta y coloidal por microorganismos).

- Lodos activos
- Aireación prolongada (procesos de oxidación total)
- Estabilización por contacto
- Otras modificaciones del sistema convencional de lodos activos: aireación por fases, mezcla completa, aireación descendente, alta carga, aireación con oxígeno puro
- Lagunaje con aireación
- Lagunas de estabilización
- Filtros biológicos (percoladores)
- Discos biológicos
- Tratamientos anaerobios: procesos de contacto, filtros (sumergidos)

Tratamiento terciario o «avanzado» (remoción BOD₅, bacterias, sólidos en suspensión, componentes tóxicos o nutrientes)

- Microtamizado,
- Filtración
- Precipitación y coagulación
- Adsorción (carbón activado)
- Intercambio iónico
- Ósmosis inversa
- Electrodialisis
- Cloración y ozonización
- Procesos de reducción de nutrientes, etc.

Tratamiento de barros (deshumidificación, estabilización y disposición del barro generado).

La calidad del efluente requerida, la naturaleza del agua a tratar y su volumen influirán en las unidades de proceso seleccionadas en el diseño de la planta de tratamiento de aguas residuales (Gray, 2004).

En esta tesis se estudian solamente los tratamientos secundarios o biológicos, específicamente las lagunas de estabilización.

1.2 Procesos Biológicos de Tratamiento de Agua: Lagunas de Estabilización

El fundamento de los tratamientos secundarios o biológicos es la asimilación de las sustancias solubles y en suspensión o particuladas, que caracterizan las aguas residuales, por parte de los microorganismos para incorporarlas al metabolismo celular y obtener energía para sus funciones vitales. Uno de este tipo de tratamientos es un sistema de lagunas de estabilización, como se mencionó en la sección anterior.

Las lagunas de estabilización se han usado ampliamente como un método de eliminación de aguas residuales desde la antigüedad. Este es un proceso que se ha desarrollado accidentalmente, con estanques contruidos inicialmente como simples depósitos de sedimentación o como tanques de retención de emergencia en plantas de tratamiento. Recientemente (Gray, 2004) se han establecido los criterios de diseño y de funcionamiento necesarios para operar con éxito las lagunas.

Ahora son aceptados como un proceso de tratamiento principal y se utilizan en todo el mundo, sirviendo a poblaciones que van desde 1000 a 100 000 habitantes. Los estanques son una alternativa popular a otros sistemas de tratamiento biológico en los países donde el acceso a tierras es económico y fácil, y hay una gran proporción de días soleados. Los lugares particularmente favorecidos son Australia, África, India, Israel, Estados Unidos, Canadá, etc. Actualmente, esta práctica se ha vuelto popular en algunos países de Europa. Algunos ejemplos de la utilización de las lagunas de estabilización en la actualidad son Francia, que posee 2500 sistemas, y cuya instalación más grande ocupa una superficie de 40 hectáreas, Canadá con más de 1000 estanques de estabilización en operación que representan aproximadamente la mitad de los sistemas de tratamiento de aguas residuales en el país, Portugal con más de 20 sistemas contruidos para servir a las zonas turísticas de la región de Algarve, las zonas rurales de los EE.UU., etc. (Gray, 2004).

Introducción

Para realizar el tratamiento de aguas residuales, el método más simple de conseguirlo es utilizando lagunas de estabilización. Están constituidas por excavaciones poco profundas en las que generalmente el espejo de agua tiene forma rectangular o cuadrada. Se utiliza para remover la materia orgánica que ocasiona la contaminación, y también para eliminar microorganismos patógenos que representan peligro para la salud. El efluente tratado puede ser utilizado en la agricultura.

Las lagunas de estabilización se clasifican generalmente por el tipo de actividad biológica que se desarrolla en ellas en anaerobias, aerobias y en lagunas de oxidación. Dentro de las lagunas de oxidación se encuentran las lagunas facultativas, de maduración, de alta producción de algas y lagos de purificación.

La eficiencia de la depuración del agua residual en las lagunas de estabilización depende ampliamente de las condiciones climáticas de la zona, temperatura, radiación solar, frecuencia y fuerza de los vientos locales, y factores que afectan directamente a la biología del sistema. Las lagunas de estabilización operan con concentraciones reducidas de biomasa, que ejerce su acción a lo largo de periodos prolongados. La eliminación de la materia orgánica en las lagunas de estabilización es el resultado de una serie compleja de procesos físicos, químicos y biológicos.

A continuación, se detallan las principales características de las lagunas aerobias, facultativas y anaerobias, que se estudian en esta tesis.

Lagunas Aerobias

Estos sistemas presentan importantes ventajas sobre los sistemas convencionales. Son fáciles de construir, operar y mantener, y son muy robustos. Debido a los elevados tiempos de retención hidráulica, las lagunas son capaces de soportar cargas orgánicas e hidráulicas tipo pulso mejor que cualquier otro proceso de tratamiento secundario de aguas residuales. Su sencillez se refleja en bajos costos de capital y de funcionamiento.

Sin embargo, los requisitos de tamaño de los terrenos necesarios para la construcción de lagunas de estabilización son significativamente más elevados que otros sistemas, por ejemplo, el de barros activados, que se utilizan en lugares donde el espacio es crítico. Un sistema de lagunas bien diseñado puede producir efluentes de alta calidad y excelentes propiedades de eliminación de todos los organismos patógenos, incluyendo virus, bacterias, protozoos, etc. Para asegurar el adecuado tratamiento se construye un sistema de distintos tipos de lagunas en serie (Gray, 2004).

En general, estas lagunas reciben aguas residuales que han sido sometidas a un tratamiento primario y que contienen relativamente pocos sólidos en suspensión.

Las lagunas aerobias se pueden clasificar, según el método de aireación sea natural o mecánico, en aerobias y aireadas respectivamente.

El grupo específico de algas, animales o especies bacterianas presentes en cualquier zona de una laguna aerobia depende de factores tales como la carga orgánica, el grado de mezcla de la laguna, el pH, los nutrientes, la luz solar y la temperatura.

Lagunas Facultativas

Las lagunas facultativas se caracterizan por tener una zona superior aeróbica y una inferior anaeróbica, con degradación activa de materia orgánica en ambas zonas. Este tipo de lagunas es que se utiliza más comúnmente, siendo capaz de lograr un tratamiento completo de las aguas domiciliarias crudas y sedimentadas, así como un amplio rango de aguas residuales orgánicas. Pueden ser clasificadas en primarias o secundarias en función de su posición dentro del sistema. A medida que la materia orgánica ingresa en la pileta, la materia orgánica coloidal se deposita en el fondo y es degradada aneróticamente, mientras que la materia orgánica soluble o suspendida se degrada por acción de las bacterias aeróbicas o facultativas.

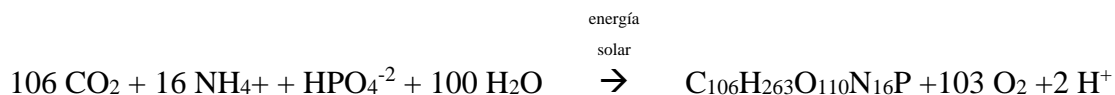
Los principales procesos que ocurren dentro de las lagunas son:

Introducción

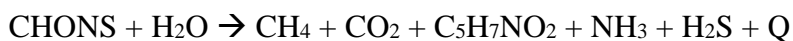
- Oxidación de la materia orgánica por la respiración de las bacterias aerobias, que consiste en la degradación de la demanda bioquímica de oxígeno (DBO) del agua residual hasta dióxido de carbono y agua produciendo energía y nuevas células.



- Producción fotosintética algal de oxígeno a partir de dióxido de carbono, donde se producen nuevas algas y el O_2 que es utilizado en la respiración bacteriana.



- Digestión anaeróbica de la materia orgánica (CHONS)



Lagunas Anaerobias.

Este tipo de lagunas se diseña principalmente para que se mantengan condiciones anaeróbicas dentro de la laguna, siendo de mayor profundidad que el resto y en general se forma una capa de espuma o grasa en la superficie que dificulta la transferencia de oxígeno con el medio.

Este tipo de lagunas se utiliza en general como un tratamiento primario con alto contenido de materia orgánica. Entonces solo se estabiliza parcialmente la materia orgánica y se requiere de otro tratamiento adicional antes de poder ser descargadas a algún cuerpo de agua. Consecuentemente, se logra reducir la capacidad requerida de los tratamientos posteriores, por ejemplo, una laguna facultativa de menor tamaño.

1.3 Producción de Bioetanol

En Argentina, se ha fomentado la producción de bioetanol, bajo los estándares del protocolo de Kioto y el más reciente el acuerdo de Paris (United Nations, 2016), mediante las leyes 26 093 y 26 334, las cuales establecen el porcentaje en volumen de bioetanol que debe agregarse a las naftas y fijan los beneficios impositivos asociados a esta

producción. Los objetivos planteados son satisfacer las necesidades de abastecimiento de bioetanol del país y generar excedentes para exportación; desarrollar y fomentar el crecimiento del sector agropecuario, de la actividad económica en general y de las economías regionales, agregándole valor a sus materias primas; y afrontar los desafíos de abastecimiento energético. Actualmente el corte obligatorio de las naftas con bioetanol corresponde a 12% (mínimo en volumen) y de gasoil con biodiesel a 10% (mínimo en volumen), establecidos por la Resolución 37/2016 del Ministerio de Energía y Minería. Dicho Ministerio junto con los fabricantes de automóviles y el Instituto Nacional de Tecnología Industrial (INTI), analizan la factibilidad de aumentar el corte de los combustibles hasta un 20% en los próximos cinco años (USDA, 2016).

Actualmente, el bioetanol es el biocombustible más común. Casi el 99% se produce a partir de granos de maíz y otros cereales, denominado bioetanol de primera generación (1G). La producción de bioetanol 1G se lleva a cabo mediante la fermentación directa del contenido de azúcar de las materias primas tales como maíz, papa, remolacha, caña de azúcar, trigo, etc.

En Estados Unidos se producen anualmente 53 a 57 billones de litros de etanol mediante el proceso de molienda seca de los granos de maíz, obteniendo también aceite de maíz y granos secos de destilería, co-producto utilizado como alimento para animales. Se estima que este nivel de producción reemplaza alrededor de 500 millones de barriles de petróleo por año. Por otro lado, en Europa se producen alrededor de 9.5 billones de litros por año. Mientras que, en Brasil, segundo productor y consumidor de etanol, se produjeron 23.5 billones de litros en el 2014 a partir de caña de azúcar, también considerado de primera generación (Ramos, Valdivia, García-Lorente, & Segura, 2016). En Argentina se produjeron 880 millones de litros en el año 2016 con un aporte del 55% de parte de cinco destilerías de maíz y del 45% de doce ingenios azucareros. Para el año siguiente, se estima

Introducción

un aumento de la producción de hasta 1.04 billones de litros como resultado del reciente incremento en el corte obligatorio de las naftas de 10% a 12% (USDA, 2016).

A pesar que el bioetanol de primera generación es una fuente de energía renovable, su producción no está exenta de controversia, especialmente por su competencia con los alimentos. Hill, Nelson, Tilman, Poloski y Tiffany (2006) propusieron que para que un biocombustible sea una alternativa viable a la gasolina, debe proveer una ganancia energética neta, tener beneficios ambientales, ser económicamente competitiva y producirse en gran escala sin reducir las provisiones de alimentos. Es claro que los biocombustibles de primera generación no cumplen con todos estos requerimientos, a pesar de las modificaciones introducidas en los últimos años, como la captación y licuefacción del dióxido de carbono durante la fermentación, para mejorar la sustentabilidad de los procesos.

En un intento de abordar la controversia generada por la competencia de los biocombustibles con la alimentación, se han investigado nuevas materias primas alternativas para la producción de bioetanol. Este enfoque es necesario también por una cuestión de volúmenes de producción, ya que, por ejemplo, se calculó que, si se utiliza todo el maíz producido en Estados Unidos para producir bioetanol, solo se cubriría el 12% de la demanda de gasolina (Hill *et al.*, 2006).

El uso de materias primas no comestibles, como la madera, residuos agrícolas (paja de trigo, tallos de maíz, residuos de soja, bagazo de caña), cultivos energéticos de rápido crecimiento, residuos forestales, residuos industriales (industria de pulpa y papel), residuos sólidos urbanos, etc., para la producción de etanol se conocen como segunda generación (2G). Estos materiales lignocelulósicos contienen hexosas y pentosas, tales como glucosa y xilosa respectivamente como los principales azúcares fermentables.

Los biocombustibles de segunda generación se consideran una alternativa prometedora frente a los de primera generación, siendo más eficientes energéticamente y amigables con el medio ambiente que los combustibles convencionales (Ramos *et al.*, 2016).

La producción de bioetanol 2G en general se lleva a cabo en tres etapas: pre-tratamiento físico-químico, hidrólisis enzimática de la biomasa y fermentación. El objetivo del pre-tratamiento es lograr que los polisacáridos (celulosa y hemicelulosa) en la materia prima lignocelulósica estén accesibles para su posterior fermentación. Los tratamientos cáusticos o con ácido diluido, seguidos por tratamientos de vapor, son los más utilizados. En la hidrólisis enzimática, los azúcares complejos se convierten en azúcares simples, que pueden ser fermentados. En esta etapa se suelen utilizar hongos que producen una mezcla de enzimas que permiten su crecimiento por la metabolización de los residuos lignocelulósicos. Sin embargo, los costos asociados a este proceso son elevados, y representan un gran porcentaje del costo total de producir biocombustibles de segunda generación.

La fermentación de la mezcla de azúcares requiere levaduras especiales capaces de simultáneamente fermentar glucosa y xilosa. A través de la ingeniería metabólica, se han modificado cepas de levadura para co-fermentar eficientemente la mezcla de azúcares (Zaldivar, Nielsen, & Olsson, 2001). Los resultados demuestran que se pueden obtener cepas capaces de convertir más del 96% de la glucosa y más del 90% de la xilosa en etanol, con rendimientos globales de fermentación mayores al 90% (Ramos *et al.*, 2016).

1.4 Objetivos de la Tesis

General

Realizar contribuciones al estudio de sistemas de reacción biológicos, en particular, sistemas de lagunas de estabilización para el tratamiento de aguas residuales y

Introducción

biorreactores para la producción de etanol, a través del empleo de estrategias avanzadas de optimización y análisis de sensibilidad global.

Específicos

Desarrollar e implementar modelos mecanísticos de creciente rigurosidad y complejidad de sistemas de biorreactores que describen la producción de etanol y sistemas de tratamiento biológico de aguas residuales basados en datos disponibles en la literatura y datos experimentales de una planta de tratamiento de aguas industriales de una empresa de productora de jugos.

Determinar los parámetros más influyentes e identificar el conjunto de aquellos parámetros que no tienen influencia en las variables de estado de los modelos dinámicos altamente no lineales estudiados, mediante el cálculo de los índices de sensibilidad global.

Llevar a cabo el diseño óptimo de una planta de tratamiento secundario de lagunas de estabilización de la materia orgánica, a fin de determinar la configuración y dimensiones que minimizan el costo total y satisfacen las restricciones ambientales en el vertido de contaminantes.

Establecer estrategias para el manejo de sistemas de lagunas de estabilización de la materia orgánica de aguas residuales industriales deficientes en nutrientes, mediante la formulación de un problema de control óptimo.

1.5 Estructura de la Tesis

La presente tesis está estructurada en 8 capítulos, detallados a continuación.

En el Capítulo 1 se presenta una breve introducción al modelado matemático de sistemas de reacción biológicos, que incluye sistemas tan diversos como fermentadores para la producción de bioetanol y sistema de lagunas de tratamiento de aguas residuales.

Las técnicas matemáticas empleadas a lo largo de la tesis se describen en el Capítulo 2. En principio, se introduce brevemente al modelado matemático dinámico. Luego, se presentan las distintas técnicas de análisis de sensibilidad global, abordando en profundidad el Método de Sobol', basado en la descomposición de la varianza. Finalmente, se describen los distintos métodos de optimización dinámica de procesos, haciendo hincapié en el enfoque de parametrización de las variables de control.

En el siguiente Capítulo se presentan distintos modelos dinámicos de biorreactores de complejidad creciente para la producción de bioetanol, utilizados previamente en entornos de optimización. El modelado de los biorreactores tiene asociado cierta incertidumbre introducida en parte por los parámetros cinéticos del modelo, que puede cuantificarse mediante la aplicación de técnicas como el análisis de sensibilidad. Específicamente se lleva a cabo el análisis de sensibilidad global mediante el Método de Sobol', determinando los perfiles temporales de los índices de sensibilidad de primer orden, total y de interacción.

En el Capítulo 4, se implementan modelos matemáticos mecanísticos dinámicos de sistemas de lagunas de estabilización para el tratamiento biológico de aguas residuales, basados en primeros principios. Se plantean balances de masa para los grupos predominantes de bacterias, fitoplancton, nutrientes, oxígeno disuelto, y distintos tipos de materia orgánica. Se evalúa el desempeño de distintas configuraciones mediante técnicas de simulación dinámica.

En los capítulos siguientes se continúa el estudio de los sistemas de lagunas de estabilización para el tratamiento de aguas residuales. En el Capítulo 5, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad global dinámico sobre todas las variables diferenciales del modelo estudiando distintos estimadores de los índices de primer orden y totales. Luego en el 6 se aborda el diseño óptimo del sistema formulando un problema de programación mixto

Introducción

entera no lineal. El objetivo es minimizar los costos totales de un sistema de tres lagunas en serie con la posibilidad de reciclo, sujeto a las restricciones medioambientales de descarga de efluentes. Se logra determinar la configuración óptima, definiendo el tipo de lagunas necesaria, y las dimensiones del sistema. Además, se estudia el impacto del aumento de la carga orgánica en la corriente de entrada.

En el Capítulo 7 se aplican estrategias de manejo de sistemas de lagunas a mediano plazo a fin de reducir la carga orgánica en el efluente de la planta, resolviendo un problema de optimización dinámica con un enfoque de parametrización de las variables de control. Para esto, se consideran dos estrategias de control: aireación mecánica y adición de nutrientes. Como resultado, se obtienen los perfiles de las variables de control a lo largo del horizonte de tiempo estudiado.

Finalmente, en el Capítulo 8 se presentan las conclusiones generales de la tesis y se discuten las posibles líneas de acción futuras.

Publicaciones y Congresos

El desarrollo de la presente tesis ha permitido las siguientes publicaciones y participaciones en congresos nacionales e internacionales.

Publicaciones en revistas y libros de aparición periódica con referato

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P. M., 2016 “Wastewater stabilization pond system: Parametric and dynamic global sensitivity analysis” *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(44): 11403-11416.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P. M., 2016, “MINLP Wastewater stabilisation pond synthesis using rigorous models under different scenarios” *Computer Aided Chemical Engineering*, 38(B): 2103-2108.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P. M., 2016, “Wastewater stabilisation pond system: Global sensitivity analysis on network design” *Chemical Engineering Transactions*, 50:187-192.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Di Maggio, J., Hoch, P. M., 2016, “Dynamic global sensitivity analysis in bioreactor networks for bioethanol production” *Bioresource Technology*, 200: 666-679.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P. M., 2014, “Optimal Control Strategies for Wastewater Stabilization Ponds” *Computer Aided Chemical Engineering*, 33: 1657-1662.

Iturmendi, F., Estrada, V., **Ochoa**, M.P., Hoch, P.M., Diaz, M.S., 2012, “Biological wastewater treatment: dynamic global sensitivity analysis and parameter estimation in a system of water stabilization ponds” *Computer Aided Process Engineering*, 30: 212-216.

Ochoa, M.P., Hoch, P. M., 2011, “Global sensitivity analysis in bioreactor networks” *Computer Aided Process Engineering*, 29: 1436-1440 (ISSN: 1570-7946, ISBN: 978-0-444-53895-6)

Introducción

Congresos Internacionales

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P.M., 2016, “Dynamic Global Sensitivity Analysis on Wastewater Stabilization Pond Networks” AIChE Annual meeting, 13-18 Nov., San Francisco, United States.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P.M., 2015, “Optimal Wastewater Stabilization Ponds System Design” AIChE Annual meeting, 8-13 Nov., Salt Lake City, Utah, United States.

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P.M., 2014, “Dynamic Model of Stabilization Pond System” AIChE Annual meeting, 16-21 Nov., Atlanta G. A., United States.

Ochoa, M.P., Hoch, P.M., 2013, “Global Sensitivity Analysis on Lignocellulosic Bioethanol Production Processes” The 3rd International Conference on Sustainable Chemical Product and Process Engineering (SCPPE 2013), 27-30 May, Dalian, China.

Ochoa, M.P., Iturmendi, F., Estrada, V., Hoch, P.M., 2012, “Optimal Control of a System of Wastewater Treatment Ponds” AIChE Annual meeting, 28 Oct.- 2 Nov., Pittsburg, United States.

Congresos Nacionales

Ochoa, M.P., Estrada, V., Hoch, P. M., 2014, “Dynamic Model of Different Configurations of Stabilization Pond Systems” Anales 43 JAIIO - SII 2014.

Ochoa, M.P., Hoch, P.M., 2013, “Análisis de Sensibilidad Global en Procesos de Fermentación para la Producción de Bioetanol utilizando Levadura Genéticamente Modificada” Anales 42 JAIIO - SII 2013.

Ochoa, M.P., Estrada, V. G., Hoch, P. M., 2013, “Control Óptimo de un Sistema de Lagunas para el Tratamiento Biológico de Aguas Residuales” Libro de trabajos completos VII CAIQ.

Ochoa, M.P., Hoch, P.M., 2010 “Análisis de sensibilidad global en redes de biorreactores” Libro de trabajos completos VI CAIQ, 02a-1359. 12 pp.

MODELADO, ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD GLOBAL Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS DINÁMICOS

En este capítulo se presentan conceptos teóricos de las técnicas numéricas y probabilísticas que se emplean a lo largo de la tesis.

2.1 Modelado de Sistemas Dinámicos

Los sistemas de ecuaciones diferenciales-algebraicas (DAE) surgen cuando se realiza la representación matemática de modelos de procesos que aparecen en muchas áreas de la ingeniería química. Las ecuaciones diferenciales describen las leyes de conservación tales como balances de masa, energía y momento en estado no estacionario, mientras que las ecuaciones algebraicas generalmente se derivan de las leyes constitutivas y de las condiciones de equilibrio, incluyendo ecuaciones para las propiedades físicas, hidráulicas y velocidades de reacción (Biegler, 2010).

Los sistemas DAE, a pesar de surgir naturalmente cuando se plantean modelos en estado no estacionario, presentan problemas numéricos y dificultades analíticas que no tienen los sistemas de ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE). La solución numérica de este tipo de problemas ha sido objeto de estudio intenso en las últimas décadas. Se logró un gran avance en el entendimiento de la estructura matemática de los DAE, el análisis de los métodos numéricos aplicados a los sistemas DAEs, el desarrollo de software

matemático robusto y eficiente para implementar los métodos numéricos, y la formulación y solución de sistemas DAE que surgen de problemas ingenieriles y científicos (Brenan, Campbell, & Petzold, 1996)

Un código muy utilizado para la resolución de problemas DAEs es DASSL, de Petzold (1988), basado en las fórmulas de diferenciación hacia atrás (*BDF Backward Differentiation Formulas*) propuestas por Gear (1971). Hay extensiones a este código, una de ellas es DASOLV que se han incorporado a simuladores de procesos como gPROMS, desarrollados por Jarvis y Pantelides (1992).

Los problemas de valor inicial con ecuaciones diferenciales ordinarias (ODE) tienen condiciones bien definidas que garantizan soluciones únicas, basadas en la continuidad de las derivadas de Lipschitz. En el caso de los sistemas DAEs, estas condiciones no están tan claramente definidas. Una manera de garantizar la existencia y unicidad de la solución es confirmar que el sistema DAE puede convertirse (al menos implícitamente) en un problema de valor inicial ODE. Por otro lado, para un análisis viable es necesario asegurar la condición de regularidad del DAE, caracterizada por su índice.

El índice del sistema DAE es un número entero que representa el mínimo número de diferenciaciones que se deben efectuar al sistema DAE o al menos a parte del mismo, con respecto a las variables independientes. Este procedimiento permite que el DAE original se reduzca a un sistema diferencial ordinario (ODE) de las variables algebraicas y diferenciales originales.

Los sistemas de alto índice surgen generalmente en ingeniería química debido a la aplicación de hipótesis simplificadoras en el modelado y a la selección deficiente de variables de entrada. La mayoría de los problemas de alto índice tienen las siguientes características: las variables diferenciales no evolucionan de forma independiente unas de otras (por lo que no pueden tener valores iniciales arbitrarios) y las variables

algebraicas no pueden resolverse solamente desacoplando las ecuaciones algebraicas, sino que se requiere manipulación y diferenciación adicional con respecto a algunas variables. Se han propuesto varios algoritmos para reducir el índice de los problemas de alto índice, uno de ellos se ha implementado en las versiones más modernas de DASOLV en gPROMS.

Sin embargo, es aconsejable formular o reformular el modelo DAE de forma tal que su índice sea 1 en lugar de depender de algoritmos para reducir el índice de forma automática, ya que estas técnicas pueden ser muy costosas computacionalmente.

2.2 Análisis de Sensibilidad Global de Sistemas Dinámicos

El análisis de sensibilidad se utiliza para estudiar el efecto de la incertidumbre en los parámetros del modelo sobre los valores de las variables dependientes (Saltelli *et al.*, 2008). El análisis de sensibilidad se puede abordar a través de metodologías locales y globales.

Los métodos locales se concentran en el impacto local de los factores sobre el modelo, evaluando los índices de sensibilidad como las derivadas parciales de primer orden de las variables dependientes con respecto a los parámetros inciertos. Esto se basa en expansiones lineales en serie de Taylor multivariable alrededor del valor nominal de los parámetros en el hiperespacio de los factores de entrada. Es un caso particular del enfoque de variación de uno en uno (OAT, por sus siglas en inglés), ya que cuando un factor varía el resto se mantiene constante. Los métodos locales no son efectivos cuando se utilizan para comparar el efecto de varios factores en las variables de salida. Además, la suposición de linealidad es generalmente válida solo dentro de un estrecho rango de variación de los parámetros inciertos. Por lo tanto, los resultados obtenidos a partir del análisis de sensibilidad local no son representativos cuando se consideran modelos altamente no lineales y todo el espacio posible de variación de parámetros. Hay claro

consenso en la bibliografía en que, si el modelo es no lineal y numerosos parámetros están afectados por incertidumbre de distinto orden de magnitud, es necesario el empleo de métodos de análisis de sensibilidad global (Cukier, Fortuin, Shuler, Petschek, & Schaibly, 1973).

Por otro lado, el análisis de sensibilidad global (ASG, o GSA por su sigla en inglés) pretende cuantificar la importancia relativa de las variables de entrada o parámetros en la determinación del valor de una variable de salida. Los métodos de GSA están basados en la exploración de todo el rango de variación de los parámetros del modelo, realizando un muestreo a partir de la función de distribución asociada a cada parámetro de entrada y simulaciones repetidas del modelo. De esta manera, estas técnicas incorporan la influencia de todo el rango de variación y la forma de la función de densidad de probabilidad de los parámetros inciertos. Mediante GSA, se evalúa el efecto del factor x_i cuando todos los demás factores $x_j, j \neq i$, varían también, a diferencia, de los enfoques locales, que evalúan el efecto de x_i cuando el resto $x_j, j \neq i$, se mantiene constante en su valor nominal.

Estos métodos tienen asociado un mayor costo computacional en comparación con los métodos locales, pero proporcionan resultados más realistas, ya que también se tiene en cuenta la interacción entre los parámetros (Saltelli, Tarantola, Campolongo, & Ratto, 2004) (Pastres & Ciavatta, 2005). En síntesis, los métodos de sensibilidad global no requieren la hipótesis de linealidad y/o aditividad del modelo.

La mayoría de las aplicaciones de análisis de sensibilidad en el área de procesos químicos y biológicos son locales o basadas en derivadas debido al hecho que estos métodos son computacionalmente muy eficientes. Sin embargo, las técnicas locales suponen linealidad y aditividad y no permiten la identificación de la interacción entre parámetros. Estas

limitaciones se pueden superar aplicando métodos de sensibilidad global, que se clasifican principalmente en tres tipos:

Métodos basados en regresiones/correlaciones

En estos métodos se realizan simulaciones Monte Carlo (MC) del modelo utilizando una matriz de factores o parámetros de entrada aleatoriamente muestreados. Se realiza una regresión lineal multivariada para relacionar los resultados del modelo con los factores y se calcula el coeficiente de regresión estandarizado ($SRC = \beta_i$) para cada factor del modelo lineal multivariado (Saltelli *et al.*, 2008). β_i es una medida de sensibilidad válida si el coeficiente de determinación (R^2) es mayor que 0.7. En términos de demanda computacional, este tipo de métodos se puede aplicar a modelos complejos con decenas de factores inciertos, requiriendo un número limitado de simulaciones MC, variando entre 500 y 1000 (Mannina *et al.*, 2014). Sin embargo, los métodos basados en regresiones solamente exploran los efectos de primer orden y no proporcionan ninguna información sobre la interacción entre los factores. Por lo tanto, estos métodos se pueden utilizar solo para la priorización de factores en los casos en que los efectos de la no linealidad no sean demasiado fuertes ($R^2 > 0.7$).

Métodos de exploración global (GSM)

El Método de Morris (1991) es el método de exploración global más utilizado. Se basa en la perturbación de uno en uno (OAT, *one-at-a-time*) de los parámetros inciertos. Para cada perturbación se cuantifica el efecto elemental, que representa la diferencia relativa entre las salidas del modelo y la perturbación i ésima del parámetro. El efecto elemental se calcula repetidas (r veces) con diferentes valores de los parámetros dentro de su espacio de variación. Para cada parámetro n , la medida de su sensibilidad se describe con la media, μ , y la desviación estándar, σ , de la función de distribución acumulada de los efectos elementales (generados al realizar r réplicas). μ es una medida de la importancia del

parámetro en la salida del modelo, mientras que σ cuantifica la no linealidad o las interacciones. La principal finalidad del Método de Morris es la determinación de los parámetros que se podrían fijar en cualquier valor de su rango de variación por no tener influencia en las salidas del modelo (*Factor Fixing*).

Métodos basados en la descomposición de la varianza

Las principales características de los métodos basados en la descomposición de la varianza son la independencia de la estructura del modelo, la capacidad de analizar la influencia de cada parámetro incierto dentro de su rango completo de variación, la capacidad de cuantificar la interacción entre los parámetros y la agrupación de parámetros (que pueden considerarse como parámetros individuales). Estos métodos permiten la identificación de los parámetros importantes del modelo a través de los efectos de primer orden y de interacción, según el valor de los distintos índices de sensibilidad. Ejemplos de métodos basados en la descomposición de la varianza son el Método de Sobol' (1993) y el test de sensibilidad de amplitud extendida de Fourier ((Extended-FAST, Extended Fourier Amplitude Sensitivity Testing), (Cukier *et al.*, 1973), (Schaibly & Shuler, 1973)). En este último se utiliza el método de Sobol' para calcular los índices de sensibilidad, basado en la misma descomposición de varianza que FAST, pero a través de la aplicación de los métodos de Monte Carlo en lugar del análisis espectral (Sobol', 1990), (Saltelli & Sobol', 1995), (Sobol', 2001), (Saltelli & Tarantola, 2002).

En los métodos basados en la descomposición de la varianza, la idea básica es que, dada una función $y=f(x)$, (donde y es una variable de salida de un modelo, y x es un vector de k parámetros de entrada del modelo), cuando todos los parámetros inciertos x_i varían bajo su función de densidad de probabilidad, la incertidumbre en $y(x)$ se puede cuantificar a través de la varianza incondicional $V(y)$.

Para determinar la contribución de cada parámetro a la varianza incondicional, se introduce el concepto de varianza condicional. A su vez, la varianza incondicional se puede descomponer como la suma de la varianza del valor esperado condicional y el valor esperado de la varianza condicional:

$$V(y) = V(E(y|x_i)) + E(V(y|x_i)) \quad (1)$$

$$V(y) = V(E(y|x_{-i})) + E(V(y|x_{-i})) \quad (2)$$

Donde V y E corresponden a los operadores de varianza y valor esperado, respectivamente. En la Ec. (1), $V_i = V(E(y|x_i))$ calcula la varianza (sobre todas las posibles realizaciones del parámetro x_i) del valor esperado condicional de la variable y bajo todas las variaciones de los parámetros, excepto de x_i . Esto representa la reducción esperada de la varianza de la variable que se podría obtener si x_i tuviera un valor conocido y fijo, y se conoce como el efecto de primer orden asociado al parámetro x_i .

El segundo término $E_i = E(V(y|x_i))$, es el valor esperado (sobre todas las realizaciones del parámetro x_i) de la varianza condicional de la variable y bajo todas las variaciones de los parámetros, excepto de x_i . El mismo representa la varianza promedio de la variable de estado que se obtendría si x_i fuera conocido.

Este concepto es análogo a lo expresando en la Ec. (2), reemplazando x_i por “todos los parámetros excepto x_i ” (x_{-i}). De esta manera, el término $V_i^{TOT} = E(V(y|x_{-i}))$ calcula la varianza promedio de la variable que quedaría si todos los parámetros excepto x_i fueran conocidos o fijos.

Si las ecuaciones (1) y (2) se dividen por la varianza incondicional, se obtienen las siguientes expresiones:

$$1 = \frac{V(E(y|x_i))}{V(y)} + \frac{E(V(y|x_i))}{V(y)} \quad (3)$$

$$1 = \frac{V(E(y|x_{-i}))}{V(y)} + \frac{E(V(y|x_{-i}))}{V(y)} \quad (4)$$

El índice de sensibilidad de primer orden, S_i (Sobol', 1993), y el índice total de sensibilidad, S_i^{TOT} (Homma & Saltelli, 1996), se definen de la siguiente manera:

$$S_i = \frac{V(E(y|x_i))}{V(y)} = \frac{V_i}{V(y)} \quad (5)$$

$$S_i^{TOT} = \frac{E(V(y|x_{-i}))}{V(y)} = \frac{V_i^{TOT}}{V(y)} \quad (6)$$

Como se puede observar en las ecuaciones (5) y (6), para calcular los índices de sensibilidad es necesario computar la varianza incondicional y condicional de cada variable de salida, lo cual implica el cálculo de integrales múltiples. En el método de Sobol' se propone una metodología para computar varianzas solo mediante evaluaciones de la función ($y=f(x)$). A continuación, se da una breve descripción del método.

Se supone que el cuadrado de la función, $y=f(x)$, es integrable y que la función se puede descomponer en términos de dimensionalidad creciente (Sobol', 2001) de la siguiente manera:

$$f = f_0 + \sum_i f_i(x_i) + \sum_i \sum_{j>i} f_{ij}(x_i, x_j) + \dots + f_{12\dots k}(x_i, x_j, \dots, x_k) \quad (7)$$

En esta expresión, se considera que el cuadrado de cada término es también integrable y es función de los parámetros a los que referencian los índices; es decir, $f_i = f_i(x_i)$,

$f_{ij} = f_{ij}(x_i, x_j)$ y así sucesivamente. Esta expansión es una Representación de Modelos de Alta Dimensionalidad (descomposición HDMR, *High-Dimensional Model Representation*) si cada término de la expansión tiene media cero, i.e.:

$$\int_0^1 f_{i_1\dots i_s}(x_{i_1} \dots x_{i_s}) dx_n = 0 \quad (8)$$

Si se cumple la condición anterior, todos los términos de la descomposición son ortogonales de a pares:

$$\int_0^1 \int_0^1 f_{i_1 \dots i_s} f_{k_1 \dots k_l} dx_i dx_k = 0 \quad (9)$$

Como consecuencia, todos los términos de la Ec. (7) pueden calcularse unívocamente utilizando el valor esperado condicionado de la variable y , de la siguiente manera:

$$E(y) = \int f(x) dx = f_0 \quad (10)$$

$$E(y|x_i) = \int f(x) \prod_{k \neq i} dx_k = f_0 + f_i(x_i) \quad (11)$$

La ecuación (10) corresponde a la definición de valor esperado de la variable y , que es función de parámetros inciertos. La ecuación (11) es la definición del valor esperado condicional de la variable y cuando el parámetro x_i es constante, y también se obtiene integrando la Ec. (7) sobre todos los parámetros excepto x_i . Integrando cada término de la Ec. (7) elevado al cuadrado se obtiene:

$$\int \int \dots \int f^2(x) dx_{i_1} \dots dx_{i_s} - f_0^2 = \sum_{s=1}^k \sum_{i_1 < \dots < i_s}^k \int \int \dots \int f_{i_1 \dots i_s}^2 dx_{i_1} \dots dx_{i_s} \quad (12)$$

donde

$$V(y) = \int \int \dots \int f^2(x) dx_{i_1} \dots dx_{i_s} - f_0^2 \quad (13)$$

$$V_{i_1 \dots i_s} = \int \int \dots \int f_{i_1 \dots i_s}^2 dx_{i_1} \dots dx_{i_s} \quad (14)$$

Donde $V(y)$ y $V_{i_1 \dots i_s}$ corresponden a la varianza incondicional y varianza condicional de la variable y , respectivamente. De esta manera, se puede derivar la descomposición ANOVA-HDMR siguiente:

$$V(y) = \sum_i V_i + \sum_i \sum_{j>i} V_{ij} + \dots + V_{12 \dots k} \quad (15)$$

Dividiendo ambos miembros de la ecuación por la varianza incondicional $V(y)$, se obtiene la siguiente descomposición en función de los índices de sensibilidad.

$$1 = \sum_i S_i + \sum_i \sum_{j>i} S_{ij} + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{l>j} S_{ijl} \dots + S_{123\dots k} \quad (16)$$

Como se indicó anteriormente, Sobol' (1993) propuso una metodología para evaluar las varianzas condicionales basado en simulaciones Monte Carlo. Más recientemente, y basados en la metodología propuesta por Sobol', se han publicado diferentes alternativas para el cálculo de los índices de sensibilidad. Saltelli *et al.* (2008) proponen una implementación que es una extensión del enfoque original propuesto por Sobol' (1993) y Homma y Saltelli (1996). Este procedimiento computa las varianzas con evaluaciones del modelo como se describe en las ecuaciones (17), (18) y (19).

$$V(y) = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N (y_A^j)^2 - \sum_{j=1}^N y_A^j y_B^j \right) \quad (17)$$

$$V(E(y|x_i)) = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N y_A^j y_{C_i}^j - \sum_{j=1}^N y_A^j y_B^j \right) \quad i = 1..k \quad (18)$$

$$V(E(y|x_{-i})) = \frac{1}{N} \left(\sum_{j=1}^N y_B^j y_{C_i}^j - \sum_{j=1}^N y_A^j y_B^j \right) \quad i = 1..k \quad (19)$$

donde N es el número de escenarios para las simulaciones Monte Carlo, A , B y C_i son matrices de N valores aleatorios para los k parámetros inciertos y y_A , y_B e y_{C_i} son vectores de N salidas del modelo obtenidas cuando las variables del modelo son evaluadas con los parámetros inciertos de las matrices A , B y C_i , respectivamente. Los pasos para la aplicación del análisis de sensibilidad global se resumen en la Tabla 1.

Los índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y totales (S_i^{TOT}) miden el efecto de la variación de los parámetros en las variables de salida del modelo. S_i proporciona la reducción en la varianza incondicional de la variable que se obtiene si el parámetro x_i se fija en su valor verdadero. Por otro lado, S_i^{TOT} tiene en cuenta las interacciones entre los parámetros, por lo tanto, proporciona información sobre la parte no-aditiva del modelo.

Tabla 1. Pasos para calcular los índices de sensibilidad.

Paso	Cálculo
1.	<p>Generación de dos sets diferentes y aleatorios de parámetros del modelo: matrices $A = (\eta, \zeta)$ y $B = (\eta', \zeta')$</p> <ul style="list-style-type: none"> - Dimensión de las matrices: $N \times k$ - η, vector de $N \times 1$ de valores aleatorios del parámetro x_i - ζ, submatriz de $N \times (k-1)$ de valores aleatorios de todos los parámetros excepto x_i
2.	<p>Definición de una nueva matriz $C_i = (\eta, \zeta')$</p> <ul style="list-style-type: none"> - Matriz C_i formada por todas las columnas de B excepto la iésima columna, que se toma de la matriz A.
3.	<p>Cálculo de las variables de estado para todos los valores de los parámetros de las matrices generadas en los pasos 1 y 2.</p> <ul style="list-style-type: none"> - Se obtienen tres vectores de $N \times 1$ de las variables de estado, $y_A = f(A)$, $y_B = f(B)$, $y_{C_i} = f(C_i)$
4.	<p>Cálculo de la varianza incondicional y condicional para las variables de estado en cada instante de tiempo</p> <ul style="list-style-type: none"> - Definidas por las ecuaciones (17), (18) y (19)
5.	Cálculo de los perfiles de los índices de sensibilidad.

En general, $\sum_{i=1}^k S_i < 1$ y $S_i < S_i^{TOT}$. Sin embargo, para un modelo puramente aditivo y con entradas ortogonales, $\sum_{i=1}^k S_i = 1$, esto puede observarse en la Ec. (16) cuando los términos de interacción se cancelan.

Un índice adicional, $S_{i,int}$, tiene en cuenta los efectos de las interacciones entre los parámetros del modelo y se puede calcular como:

$$S_{i,int} = S_i^{TOT} - S_i \quad (20)$$

Por ejemplo, dada una función $y = f(A, B, C)$, sus índices de sensibilidad se representan como se muestra en la Figura 2.

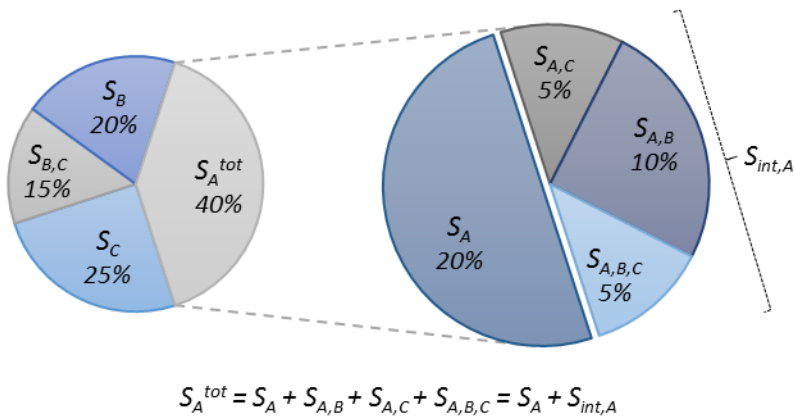


Figura 2. Representación gráfica de los diferentes tipos de índice de sensibilidad.

La Tabla 2 brinda información sobre la influencia del parámetro x_i basada en el valor de sus índices.

Tabla 2. Influencia de los parámetros basada en los valores de sus índices

Índices	Valor Relativo	Condición del parámetro x_i
S_i	Alto	Parámetro influyente
$S_{i,int}$	Alto	Importantes interacciones entre x_i y otros parámetros
$S_{i,int}$	Bajo	Interacciones bajas o nulas entre x_i y otros parámetros
S_i y S_i^{TOT}	Bajo	Parámetro no influyente

S_i , $S_{i,int}$ y S_i^{TOT} hacen referencia al índice de sensibilidad de primer orden, de interacción y total para el parámetro i .

En la presente tesis, se lleva a cabo análisis de sensibilidad global sobre modelos dinámicos, determinando perfiles temporales de los índices de sensibilidad en lugar de valores puntuales, lo cual permite un profundo conocimiento de las fuentes de incertidumbre a lo largo del horizonte de tiempo.

2.3 Optimización de Procesos Dinámicos

Un problema de optimización sujeto a restricciones que constituyen un sistema de ecuaciones diferenciales algebraicas se puede formular, en forma semi-explicita de la siguiente manera:

$$\min \Phi(z(t_f)) \quad (21)$$

Sujeto a

$$\frac{dz}{dt} = f(z(t), y(t), u(t), p) \quad (22)$$

$$h(z(t), y(t), u(t), p) = 0 \quad (23)$$

$$g(z(t), y(t), u(t), p) \leq 0 \quad (24)$$

$$h_p(z(t_f)) = 0 \quad (25)$$

$$g_p(z(t_f)) \leq 0 \quad (26)$$

$$z(t_0) = z^0 \quad (27)$$

$$z^{LB} \leq z(t) \leq z^{UB} \quad (28)$$

$$y^{LB} \leq y(t) \leq y^{UB} \quad (29)$$

$$u^{LB} \leq u(t) \leq u^{UB} \quad (30)$$

$$p^{LB} \leq p \leq p^{UB} \quad (31)$$

En esta formulación, t es la variable independiente, que representa al tiempo en la mayoría de las aplicaciones en ingeniería química, pero también podría representar una coordenada espacial, $t \in [0, t_f]$.

El sistema DAE representa el modelo del sistema. Las ecuaciones diferenciales surgen de la aplicación de los principios de conservación de las cantidades fundamentales: la velocidad de acumulación de una cantidad dentro de los límites de un sistema es la

diferencia entre la velocidad a la que dicha cantidad entra al sistema menos la velocidad a la que sale del mismo, más la velocidad neta de producción interna. En los sistemas de procesos químicos, las cantidades fundamentales que se conservan son masa, energía y momento. Entonces las leyes de conservación se expresan como balances de estas cantidades.

Las ecuaciones algebraicas (expresión (23)) corresponden a las ecuaciones constitutivas, que generalmente se basan en leyes físicas y químicas. Incluyen definiciones básicas de las cantidades fundamentales en términos de sus propiedades físicas, como densidad, temperatura, etc.; ecuaciones termodinámicas, mediante ecuaciones de estado y de equilibrio químico y de fases; ecuaciones de velocidad de transporte tales como la ley de Fick para la transferencia de masa, la ley de Fourier para la conducción de calor, la ley de Newton de viscosidad para la transferencia de momento; expresiones cinéticas; ecuaciones hidráulicas; etc.

Las variables de estado diferenciales y algebraicas se representan por $z(t)$ e $y(t)$, respectivamente. Las variables diferenciales generalmente corresponden a las cantidades fundamentales que se conservan. Las variables algebraicas generalmente se relacionan con variables diferenciales y corresponden a propiedades físicas y químicas, velocidades de reacción, propiedades termodinámicas, etc.

$u(t)$ y p representan los grados de libertad en el problema formulado a raíz de las ecuaciones (21) a (31). El primer vector, $u(t)$, depende de t y representa las variables de control u optimización. En ejemplos de ingeniería química, corresponderían a los perfiles de los caudales de las corrientes, de las utilidades, etc. El vector p corresponde a los parámetros independientes del t , podría representar el volumen de reactor en un problema de diseño de un reactor batch o algún parámetro cinético en un problema de estimación de parámetros.

La función objetivo escalar Φ se calcula al final del horizonte de integración. Esta representación es lo suficientemente general como para adecuarse a una gran variedad de situaciones alternativas. Si la función objetivo depende de varias variables diferenciales de estado y algebraicas, se agrega una nueva ecuación algebraica al modelo para definir la nueva variable algebraica como la función objetivo. O bien, si la función objetivo Φ incluye un término integral sobre la variable independiente t :

$$\Phi = \int_0^{t_f} \Psi(z(t), y(t), v(t), p) dt \quad (32)$$

Se puede re-escribir de una forma escalar, mediante la definición de una nueva variable diferencial z_0 , reemplazando el término integral en la función objetivo y agregando una ecuación diferencial adicional cuyo lado derecho corresponde al término integral con la condición inicial $z_0=0$, de la siguiente manera:

$$\Phi = z(t_f) \quad (33)$$

$$\frac{dz_0}{dt} = \Psi(z(t), y(t), v(t), p) \quad (34)$$

$$z_0(0) = 0 \quad (35)$$

LB y UB son las cotas inferiores y superiores de las variables, respectivamente.

Hay dos enfoques principales para la resolución numérica de los problemas de optimización dinámica: los métodos indirectos y directos (Diaz & Biegler, 2015).

Los enfoques indirectos o variacionales se basan en el principio máximo de Pontryagin (Pontryagin, Boltyanskii, Gamkrelidze, & Mishchenko, 1962), en el cual las condiciones de optimalidad de primer orden se derivan aplicando cálculo variacional. Para problemas sin restricciones de desigualdad, las condiciones de optimalidad se pueden escribir como un conjunto de ecuaciones diferenciales-algebraicas (DAE) que posteriormente puede ser resuelto como un problema de condiciones de borde de dos puntos. En cambio, si hay

restricciones de camino de desigualdad (*path constraints*) se requieren condiciones de optimalidad adicionales, y la determinación de los puntos de entrada y salida para las restricciones activas a lo largo del horizonte de integración resulta en un problema combinatorio, que en general es difícil de resolver.

Por otro lado, en los enfoques directos se busca transformar el problema DAE en un NLP, donde se emplean funciones a tramos para aproximar las variables de control (enfoque secuencial) o las variables de control y de estado (enfoque simultáneo). Los coeficientes de las funciones utilizadas para realizar las aproximaciones son las variables de optimización, $x \in R^n$, del problema NLP resultante

$$\min F(x) \tag{36}$$

Sujeto a

$$h(x) = 0 \tag{37}$$

$$g(x) \leq 0 \tag{38}$$

$$x^{LB} \leq x \leq x^{UB} \tag{39}$$

En líneas generales, los métodos directos se pueden clasificar en dos enfoques: simultáneo y parametrización del vector de las variables control (CVP). El número de variables, n , y restricciones en el problema de optimización no-lineal depende del tipo de método directo utilizado, variando desde unas pocas en el enfoque CVP hasta un gran número en el enfoque simultáneo.

En el Capítulo 7 de esta tesis, se formula un problema de optimización dinámica, con un enfoque de parametrización del vector de las variables de control. En este enfoque, las variables de control (grados de libertad dependientes del tiempo) pueden ser aproximadas por funciones del tipo constante a tramos (*piecewise-constant*), lineal a tramos (*piecewise linear*), continua lineal a tramos y polinomial, sobre un número específico de intervalos

de control. En general, la decisión de la forma de las variables de control es una cuestión ingenieril, ya que depende de las capacidades del sistema de control, siendo los controles constantes a tramos la opción más fácil de implementar.

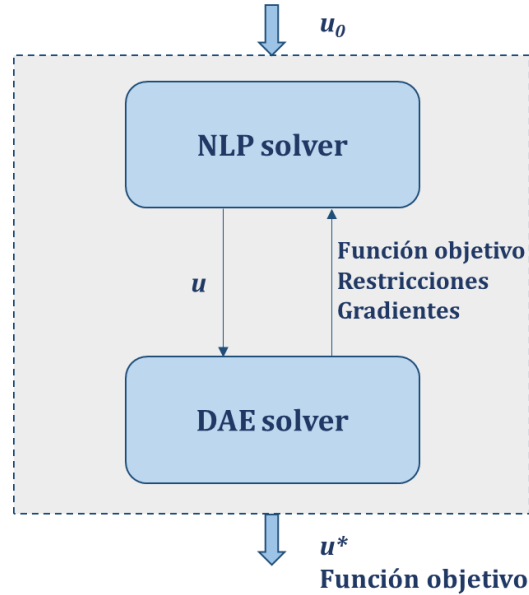


Figura 3. Esquema del enfoque CVP.

Se formula un NLP a nivel exterior, con los coeficientes de las funciones de control $u(t)$ y los parámetros v como variables de optimización, como se puede observar en el esquema de la Figura 3. En el nivel interno, no hay grados de libertad ya que se fijan los valores de los perfiles de las variables de control con la solución del problema externo. Entonces se puede integrar el sistema DAE utilizando algún algoritmo de resolución comercial para sistemas DAE. Como el número de variables de control es generalmente bajo en comparación al número total de variables, el problema NLP resultante tiene un pequeño número de variables de optimización.

En el enfoque de parametrización del vector de las variables de control, se distinguen dos estrategias: único disparo (o secuencial) y múltiples disparos, dependiendo del grado de discretización de las variables de control. En la estrategia de único disparo, el sistema DAE, inicializado en $t=0$, se integra a lo largo del horizonte de tiempo para perfiles dados de las variables de control (Figura 4 (a)). De ese modo, se determinan los perfiles de las

variables de estado diferenciales y algebraicas junto con el valor de la función objetivo y las restricciones. En este paso, se determinan las derivadas parciales de las ecuaciones diferenciales y algebraicas con respecto a las variables de optimización (parámetros a ser estimados) sobre todo el horizonte de integración. Se obtienen integrando las ecuaciones de sensibilidad junto con el sistema DAE original. La solución de las ecuaciones de sensibilidad resulta, en general, el paso más costoso computacionalmente de este enfoque. La información sobre la función objetivo, las restricciones y las sensibilidades (es decir, los gradientes de las restricciones y de la función objetivo con respecto a los parámetros a ser estimados) se transfiere al problema NLP exterior, donde se actualizan los valores de los parámetros v y los coeficientes de las funciones de control $u(t)$ y luego se transfieren para resolver el siguiente problema DAE interno.

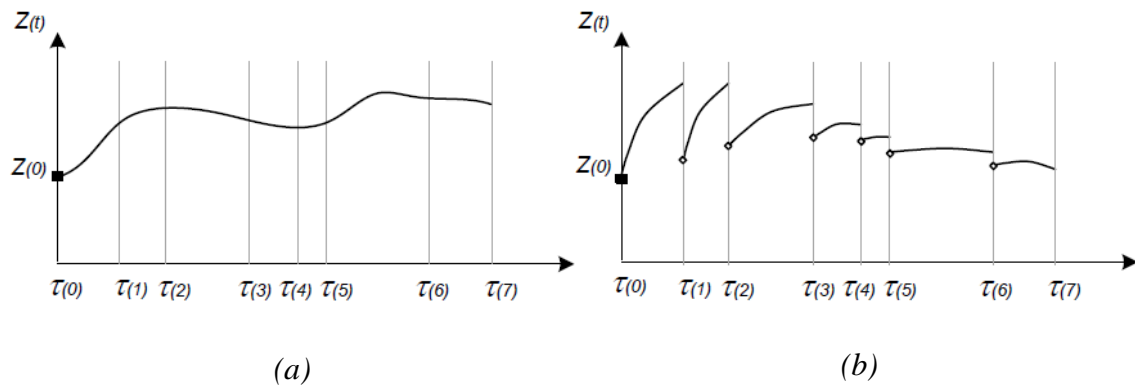


Figura 4. Parametrización del vector de variables de control: (a) único disparo y (b) múltiples disparos (PSEnterprise Ltd., 2014).

En la estrategia de disparo múltiple, el horizonte de integración se divide en varios intervalos, con las variables de control aproximadas por polinomios en cada intervalo y las variables de estado diferenciales inicializadas en cada intervalo, como se muestra en la Figura 4 (b). El sistema DAE se resuelve individualmente dentro de cada intervalo de control. Los perfiles de las derivadas parciales con respecto a las variables de optimización y las condiciones iniciales de las variables de estado diferenciales en cada intervalo de control se obtienen mediante la integración de las ecuaciones de sensibilidad.

Dichos perfiles de las variables de estado y de sensibilidad se resuelven independientemente sobre cada intervalo e incluso pueden calcularse en paralelo. También se incluyen ecuaciones adicionales en el problema NLP para asegurar la continuidad de las variables de estado en los extremos de los intervalos.

La estrategia de disparo simple es más apropiada para modelos DAE grandes, con gran cantidad de variables diferenciales y relativamente pocos intervalos y variables de control. Mientras que la estrategia de disparo múltiple se aplica preferentemente en problemas que requieren mayor número de intervalos con relativamente pocas variables diferenciales (PSEnterprise Ltd., 2014).

Las estrategias CVP son relativamente fácil de construir y aplicar ya que para resolver el problema DAE junto con las ecuaciones de sensibilidad se puede utilizar algún algoritmo de resolución de DAE comercial como DASSL (Petzold L., 1982), DASOLV (Jarvis & Pantelides, 1992) y DAEPACK (Tolsma & Barton, 2000). El problema externo NLP se resuelve con solvers como IPOPT (Wächter & Biegler, 2006), NPSOL (Gill, Murray, Saunders, & Wright, 1986), y SNOPT (Gill, Murray, & Saunders, 2005) (Gill, Murray, & Saunders, 1996). Tanto el método del único disparo como múltiples disparos están implementados en el entorno de gPROMS, denominados CVP_MS y CVP_SS, respectivamente (PSEnterprise Ltd., 2014).

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD GLOBAL EN SISTEMAS DINÁMICOS PARA LA PRODUCCIÓN DE BIOETANOL

3.1 Introducción

Los modelos de biorreactores batch y fed-batch se formulan como sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas que resultan de la formulación de balances de masa para los sustratos, biomasa y productos, expresiones cinéticas, ecuaciones de diseño, ecuaciones hidráulicas, etc. Los modelos incluyen varios parámetros relacionados con las cinéticas de reacción, cuyos valores en general son inciertos. Los valores de las variables de estado pueden ser muy influenciados por los valores de los parámetros del modelo. Debido a que estos parámetros generalmente se determinan experimentalmente, pues su estimación teórica muchas veces es imposible, puede haber incertidumbre asociado a su valor final. Por esta razón, es importante identificar los parámetros a los cuales las variables de estado son más sensibles. Para ello se pueden aplicar técnicas de análisis de sensibilidad (SA), que, como se mencionó en la Sección 2.2, se clasifican en locales y globales.

GSA se ha aplicado solo a algunos sistemas biológicos durante la última década. Kiparissides, Kucherenko, Mantalaris y Pistikopoulos (2009) compararon los resultados

obtenidos con el método de Sobol' y el método "*Derivative based Global Sensitivity Measures*" (DGSM), basado en el tiempo computacional, aplicando ambos métodos a un modelo biológico de complejidad moderada (5 variables de estado diferenciales y 16 parámetros) en tres instantes de tiempos. Los resultados obtenidos fueron similares para los dos métodos, siendo el de Sobol más costoso computacionalmente. Realizaron el mismo análisis en un modelo más realista de 15 variables diferenciales y 33 parámetros, agrupando los parámetros en 5 grupos en vez de considerarlos individualmente. Por su parte, Di Maggio, Diaz Ricci y Diaz (2010) llevaron a cabo GSA sobre una red metabólica dinámica para determinar los parámetros más influyentes en las reacciones bioquímicas intracelulares. Ochoa y Hoch (2011) también han aplicado la técnica en una red de biorreactores dinámica. Además, Kent, Neumann, Kummer y Mendes (2013) aplicaron GSA a una selección de 5 modelos metabólicos para estudiar cómo los resultados pueden cambiar bajo cantidades crecientes de incertidumbre en los parámetros.

Otro ejemplo de GSA en modelos biológicos fue presentado por Román-Martínez, Lanuza-Pérez y Cepeda-Rodriguez (2014), en el control de tratamientos de aguas residuales. Más recientemente, Savvopoulos, Misener, Panoskaltsis, Pistikopoulos y Mantalaris (2015) llevaron a cabo un GSA en un modelo matemático de células B de la leucemia linfocítica crónica utilizando el método de representación matemática de alta dimensión con muestreo aleatorio a fin de determinar los parámetros más críticos del modelo.

Por otra parte, teniendo en cuenta la producción de biocombustibles, las técnicas de GSA se han aplicado solamente a modelos en estado estacionario. Se han utilizado tres métodos distintos: basado en la varianza, independientes del momento y basado en la entropía, que se aplicaron para cuantificar la contribución de los parámetros individuales en el análisis

tecno-económico de la producción de biodiesel (Tang, Zhenzhou, Zhiwen, & Ningcong, 2015). Todri *et al.* (2014) utilizaron GSA en un proceso de producción de bioetanol, reemplazando los modelos complejos con modelos subrogados. Más recientemente, Muhaimin Samsudin y Mat Don (2015) llevaron a cabo simulaciones Monte Carlo en un modelo de fermentación de aceite de palma para evaluar la incertidumbre del modelo, pero realizaron un análisis local (perturbando cada parámetro en un 10 y 50 %) para analizar la sensibilidad paramétrica.

En este Capítulo se lleva a cabo un análisis de sensibilidad paramétrica en redes de biorreactores, mediante la aplicación de estrategias de análisis de sensibilidad global. El objetivo es determinar y confeccionar un ranking de los parámetros más influyentes en modelos de biorreactores de complejidad creciente. Se implementan y analizan los siguientes modelos (i) un fermentador; (ii) una red compuesta por un pre-fermentador y un fermentador en serie para la producción de bioetanol a partir de destilados de vinazas y melazas; (iii) un co-fermentador de glucosa y xilosa donde se utiliza una cepa de levadura genéticamente modificada. Los modelos matemáticos incluyen ecuaciones diferenciales que describen los balances de masa en los fermentadores, así como también algebraicas para las expresiones cinéticas y las conexiones entre los reactores en el caso de la red. Tanto los modelos de biorreactores como la metodología de GSA fueron implementados en un entorno de optimización con un enfoque orientado a ecuaciones en gPROMS (PSEnterprise Ltd., 2014). Se utilizó la metodología propuesta por Sobol' (1993) para realizar el análisis de sensibilidad global, basada en la descomposición de la varianza, extendiendo su aplicación a un modelo dinámico. De esta manera es posible calcular los perfiles temporales de los índices de sensibilidad de primer orden y aquellos debidos a la interacción con otros parámetros para los tres modelos estudiados.

3.2 Modelado de Biorreactores y Redes de Biorreactores para la Producción de Bioetanol

Durante las últimas décadas hubo un interés creciente en la producción de biocombustibles para complementar la provisión que se obtiene a partir de los combustibles fósiles. En particular, la producción de etanol a partir de fuentes renovables puede mejorar la seguridad energética, reducir las emisiones de dióxido de carbono y disminuir la contaminación del aire (Chen & Wang, 2010). Actualmente, más del 80 % de los vehículos ligeros pueden utilizar mezclas de combustible y bioetanol (Datta, Maher, Jones, & Brinker, 2011) y en muchos países se ha legislado la comercialización de naftas con cortes de bioetanol cada vez más elevados. En la actualidad, el interés por el etanol como combustible para el transporte se ha incrementado sustancialmente.

Los fermentadores constituyen el corazón de las plantas de bioetanol y se ha dedicado mucho esfuerzo en mejorar los microorganismos y las condiciones de operación (Romaní, Pereira, Johansson, & Domingues, 2015). Corsano, Aguirre, Iribarren y Montagna (2004) proponen el diseño óptimo de una red de biorreactores para la producción de bioetanol, mediante la formulación de un problema de programación mixto entera no lineal. Muchos autores han propuesto modelos para la producción de bioetanol por co-fermentación, utilizando hexosas y pentosas como materias primas. Krishnan, Ho y Tsao (1999) formulan un modelo de co-fermentación a partir de glucosa y xilosa utilizando una cepa de levadura *Saccharomyces* genéticamente modificada. Más recientemente, Moreno, Andersen y Diaz (2013) proponen y calibran un modelo, también de co-fermentación, con una cepa de *Zymomonas mobilis* genéticamente modificada, teniendo en cuenta, entre otros, procesos de inhibición por furfural e hidroximetilfurfural (HMF).

A continuación, se presentan y analizan los siguientes modelos (i) un fermentador; (ii) una red compuesta por un pre-fermentador y un fermentador en serie para la producción de bioetanol a partir de destilados de vinazas y melazas; (iii) un co-fermentador de glucosa y xilosa donde se utiliza una cepa de levadura genéticamente modificada. Los modelos matemáticos incluyen ecuaciones diferenciales que describen los balances de masa en los fermentadores y ecuaciones algebraicas para las cinéticas de reacción y las conexiones entre los reactores de la red.

Los modelos cinéticos (i) y (ii) fueron propuestos en el marco de un problema de optimización con fines de diseño (Corsano, Iribarren, Montagna, Aguirre, & Suarez, 2006), (Corsano, Vecchiatti, & Montagna, 2011), (Albernas-Carvajal, Corsano, Kafarov, González Cortés, & González Suárez, 2014). El modelo (iii) fue utilizado para el diseño óptimo de co-fermentadores (Chen & Wang, 2010) y en un marco de modelado dinámico para la evaluación de diferentes condiciones operativas (Morales-Rodriguez , Meyer, Gernaey, & Sin, 2011). Más recientemente, fue implementado en un marco optimización multi-objetivo (Sharma & Rangaiah, 2013). Sin embargo, no se han llevado a cabo estudios de sensibilidad paramétrica sobre estos modelos de alta no linealidad. A continuación, se describen los modelos propuestos.

Modelo (i)

Se considera un proceso de fermentación en el cual se utilizan subproductos y residuos de la producción alimentaria como sustratos, tales como melazas diluidas en destilados de vinazas (Corsano *et al.*, 2004).

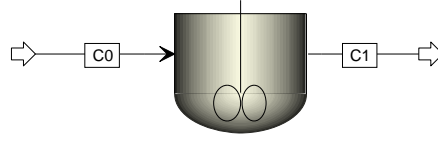


Figura 5. Esquema del fermentador del Modelo (i)

La Figura 5 muestra el esquema del proceso. Las melazas son subproductos obtenidos a partir de una planta de azúcar, mientras que los destilados de vinazas son el residuo no destilado en el proceso de producción de bioetanol. El modelo, que se describe esquemáticamente en la Figura 5, representa un fermentador donde se produce bioetanol y biomasa simultáneamente e incluye balances de masa dinámicos para la biomasa, el sustrato, la biomasa no-activa y el producto (Ecs. (40)-(43)).

$$\text{Biomasa} \quad \frac{dX}{dt} = \mu X - v_{dead} X \quad (40)$$

$$\text{Sustrato} \quad \frac{dS}{dt} = -\frac{\mu X}{Y_{x/s}} \quad (41)$$

$$\text{Biomasa no-activa} \quad \frac{dX_{dead}}{dt} = v_{dead} X \quad (42)$$

$$\text{Producto} \quad \frac{dP}{dt} = \frac{\mu X}{Y_{x/p}} \quad (43)$$

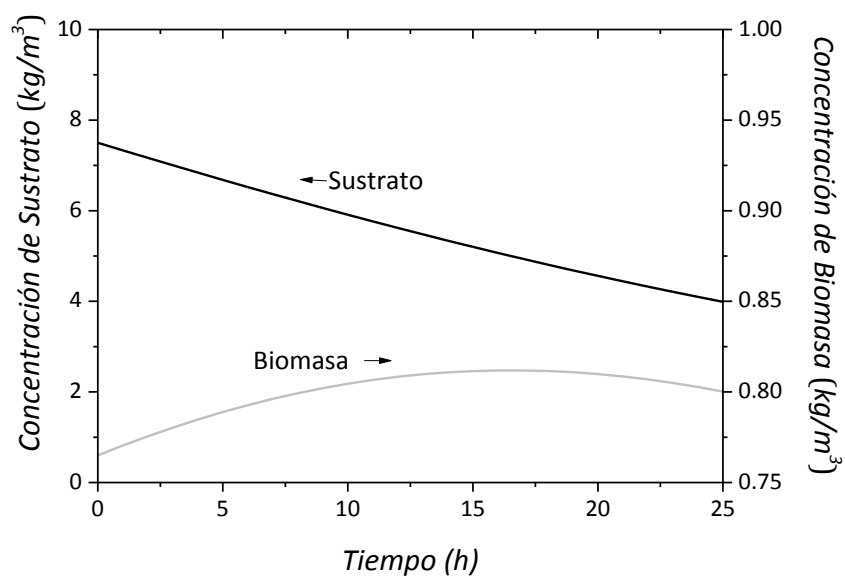
La Ec. (44) describe la velocidad de crecimiento con una cinética de tipo Monod en el fermentador.

$$\text{Velocidad de Crecimiento} \quad \mu = \mu_{max} \frac{S}{K_s + S} \quad (44)$$

El modelo consta de 5 parámetros que se detallan en la Tabla 3, se implementó en el entorno gPROMS. Las Figuras 6 y 7 muestran los perfiles de concentración de sustrato, biomasa y producto.

Tabla 3. Descripción de los parámetros del modelo del fermentador.

<i>Parámetro</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>
μ_{max}	Velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa	0.10	h^{-1}
$Y_{x/s}$	Coeficiente de rendimiento de biomasa	0.124	-
$Y_{x/p}$	Coeficiente de rendimiento de producto	0.23	-
K_s	Constante de saturación de sustrato	20	kg/m^3
v_{dead}	Velocidad de muerte de biomasa	0.02	h^{-1}

Referencia: Corsano *et al.* (2004).**Figura 6.** Perfiles de concentración de Sustrato y Biomasa para el Modelo (i) evaluado con los valores nominales de los parámetros

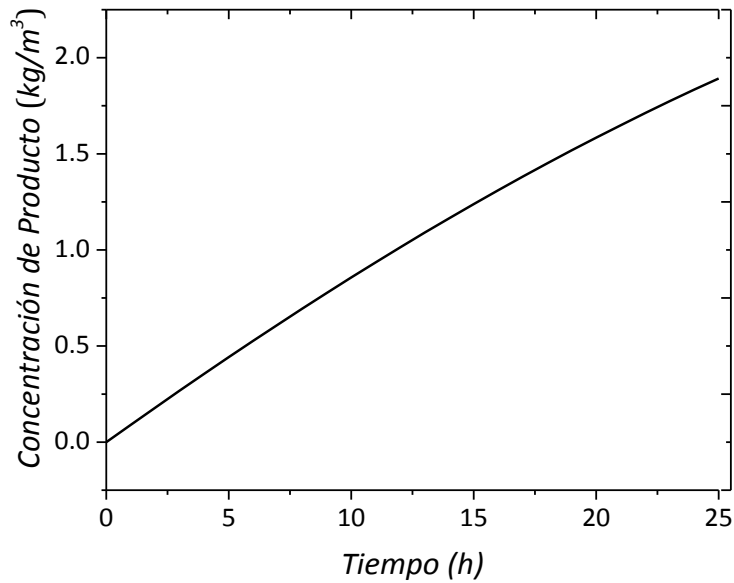


Figura 7. Perfil de concentración de Producto del Modelo (i), evaluado con los valores nominales de los parámetros

Modelo (ii)

Este modelo representa una red de dos biorreactores discontinuos en serie a través de las ecuaciones (6) a (19); el sustrato es una mezcla de melazas diluidas en destilado de vinaza. Se adoptó la configuración óptima determinada por Corsano *et al.* (2004): un reactor aeróbico seguido por uno anaeróbico como se muestra en la Figura 8.

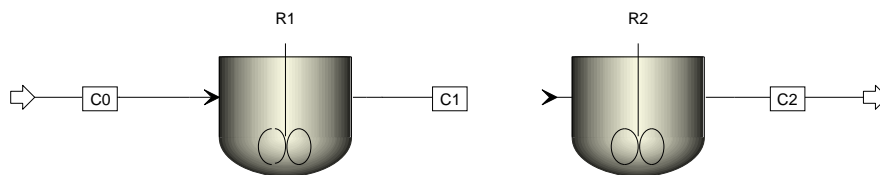


Figura 8. Esquema de la red de biorreactores del Modelo (ii).

El primer biorreactor de la red (R1) es un pre-fermentador donde solo se lleva a cabo producción de biomasa y los balances de masa se describen a través de las ecuaciones (45) a (47), fijando el valor del subíndice $i=1$.

$$\text{Biomasa} \quad \frac{dX_i}{dt} = \mu_i X_i - v_{dead} X_i \quad i = 1, 2 \quad (45)$$

$$\text{Sustrato} \quad \frac{dS_i}{dt} = -\frac{\mu_i X_i}{Y_{xs_i}} \quad i = 1, 2 \quad (46)$$

$$\text{Biomasa no-activa} \quad \frac{dX_{dead_i}}{dt} = v_{dead} X_i \quad i = 1, 2 \quad (47)$$

La velocidad de crecimiento es de tipo Monod, al igual que en el modelo anterior.

$$\text{Velocidad de Crecimiento} \quad \mu_i = \mu_{max_i} \frac{S_i}{K_s + S_i} \quad i = 1, 2 \quad (48)$$

En este caso, el coeficiente de rendimiento de biomasa, $Y_{x/s,i}$, se describe con la ecuación empírica (49) y depende de la fuente de carbohidratos (De la Cruz Soriano, González Suárez, & Pedraza Gárciga, 2003). Las variables x_{ij} representan la fracción del total de azúcar reducida provista por las melazas ($j=1$) y vinazas ($j=2$) en el biorreactor i .

$$\text{Coeficiente de} \quad Y_{xs,1} = 0.3689 x_{1,1} + 0.2522 x_{1,2} + 0.3736 x_{1,1} x_{1,2} \quad (49)$$

$$\text{Rendimiento} \quad x_{i,1} + x_{i,2} = 1 \quad i = 1, 2 \quad (50)$$

El segundo biorreactor (R2), donde ocurre la fermentación alcohólica, es de tipo anaeróbico para favorecer la producción de bioetanol. Las ecuaciones (45) a (48) y (51) con subíndice $i=2$ describen los balances de masa dinámicos del fermentador.

$$\text{Producto} \quad \frac{dP_i}{dt} = \frac{\mu_i X_i}{Y_{xp_i}} \quad i = 2 \quad (51)$$

Las ecuaciones de relaciones de volumen dentro de la red, inoculación del primer biorreactor y contribución de los distintos azúcares se detallan a continuación.

$$\text{Ecuaciones de} \quad FEED_i = DV_i + M_i \quad i = 1, 2 \quad (52)$$

$$\text{Volumen} \quad V_1 = FEED_1 + V_{inoc} \quad i = 1 \quad (53)$$

$$V_i = \text{FEED}_i + V_{i-1} \quad i > 1 \quad (54)$$

$$V_i S_{i0} x_{1i} = M_i S_M \quad i = 1 \quad (55)$$

Contribución de

$$V_i S_{i0} x_{1i} = M_i S_M + V_{i-1} S_{i-1} x_{1i-1} \quad i > 1 \quad (56)$$

azúcar en la

$$V_i S_{i0} x_{2i} = DV_i S_{DV_i} \quad i = 1 \quad (57)$$

alimentación

$$V_i S_{i0} x_{2i} = DV_i S_{DV_i} + V_{i-1} S_{i-1} x_{2i-1} \quad i > 1 \quad (58)$$

Es importante notar que, para el pre-fermentador, el coeficiente de rendimiento de biomasa se calcula utilizando la ecuación (49), mientras que en el fermentador tanto el coeficiente de rendimiento de biomasa, $Y_{x/s,2}$, como el de producto, $Y_{x/p,2}$, son parámetros del modelo. El modelo (ii) tiene 6 parámetros, cuya descripción y valor nominal se presentan en la Tabla 2. Las Figuras 9 y 10 presentan los perfiles temporales de concentración de sustrato, biomasa y producto a lo largo de la red, para los valores nominales de los parámetros.

Tabla 4. Descripción de los parámetros del Modelo (ii), que representa una red de biorreactores.

<i>Parámetro</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>
$\mu_{max,1}$	Velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa en el pre-fermentador	0.50	h^{-1}
$\mu_{max,2}$	Velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa en el fermentador	0.10	h^{-1}
$Y_{x/s,2}$	Coeficiente de rendimiento de biomasa	0.124	-
$Y_{x/p}$	Coeficiente de rendimiento de producto	0.23	-
K_s^*	Constante de saturación de sustrato	20	kg/m^3
v_{dead}^*	Velocidad de muerte de biomasa	0.02	h^{-1}

(*) son parámetros comunes para ambos biorreactores de la red. Referencia: (Corsano, Aguirre, Iribarren, & Montagna, 2004).

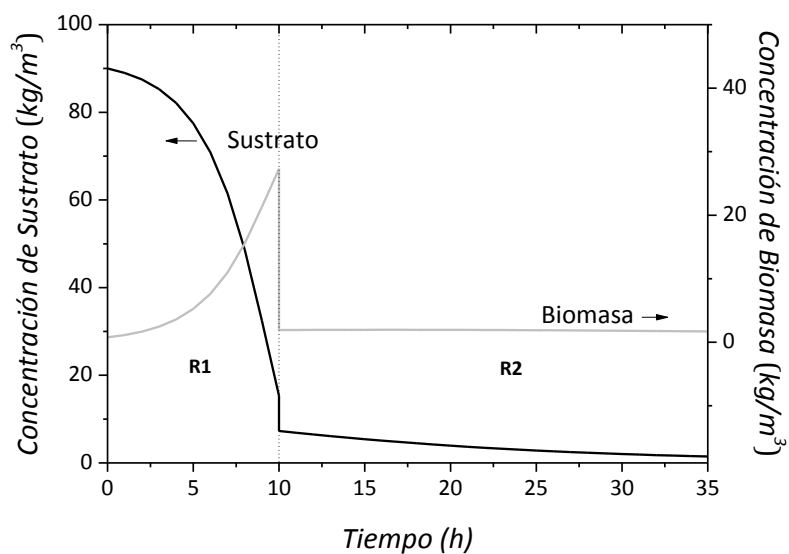


Figura 9. Perfiles de concentración de Sustrato y Biomasa del Modelo (ii) evaluados con los valores nominales de los parámetros

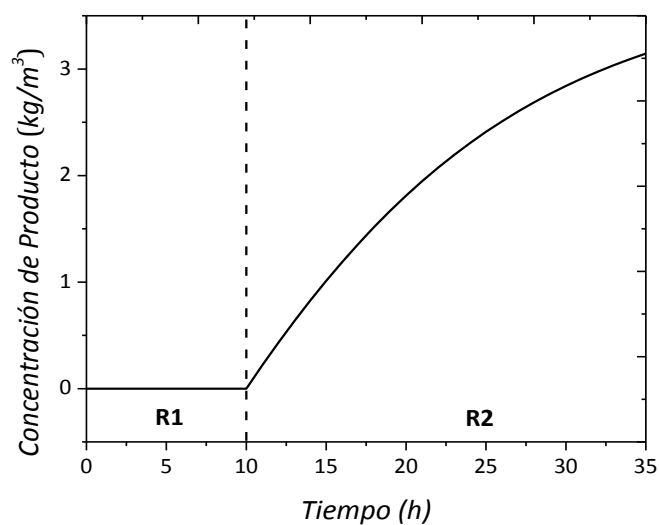


Figura 10. Perfil de la concentración de Producto del Modelo (ii) evaluados con los valores nominales de los parámetros.

Modelo (iii)

Obtener bioetanol de material lignocelulósico es uno de los grandes desafíos actuales para la industria de biocombustibles en el mundo. El uso de esta clase de materiales permite obtener un biocombustible que no compite con la alimentación mientras tiene el potencial

de contribuir significativamente a la obtención de energía renovable. Para producir bioetanol se han identificado varias materias primas lignocelulósicas que pueden ser utilizadas como sustratos económicos, como la madera, residuos de papel, residuos agrícolas y cultivos energéticos de rápido crecimiento. Cuando se produce la hidrólisis de los materiales lignocelulósicos se obtienen sustratos que contienen azúcares fermentables, tales como pentosas y hexosas. Las pentosas están compuestas por D-xilosa y L-arabinosa, siendo la hexosa predominante la D-glucosa.

Los microorganismos en general son selectivos a una clase de azúcar fermentable en particular, lo cual hace difícil la co-fermentación, o utilización de sustratos con más de una clase de azúcar fermentable en su composición, como es el caso del hidrolizado lignocelulósico. Sin embargo, los avances en la ingeniería genética permitieron el desarrollo de organismos genéticamente modificados capaces de fermentar glucosa y xilosa simultáneamente. Particularmente, las levaduras del género *Saccharomyces* son muy utilizadas en los procesos comerciales de conversión de biomasa a bioetanol ya que son las tradicionalmente utilizadas en la producción de alcoholes, presentan alta tolerancia al bioetanol y otros inhibidores, y no menos importante, se les ha otorgado la característica de GRAS (*Generally Regarded As Safe*, generalmente considerado seguro) y se las utiliza con frecuencia como potenciadoras de nutrientes en los alimentos para animales.

En el año 1998, Ho, Chen, y Brainard (1998) reportaron el desarrollo de una cepa de levadura recombinante del género *Saccharomyces* a la que se denominó 1400 (pLNH33), capaz de co-fermentar glucosa y xilosa a bioetanol en el mismo medio y simultáneamente, con altos rendimientos de bioetanol. En esta tesis se utilizan las ecuaciones cinéticas propuestas por Krishnan *et al.* (1999) para describir el crecimiento de biomasa y la

formación de productos a partir de mezclas de (2R, 3R, 4S, 5R, 6R)-6-(hidroximetil) tetrahydro-2H-pirano-2,3,4,5-tetraol y (2R, 3S, 4R)-2,3,4,5-Tetrahidroxipentanal, conocidos como glucosa y xilosa respectivamente, empleando la cepa modificada. Las ecuaciones (59) a (62) representan los balances de masa dinámicos para el producto obtenido a partir de glucosa y xilosa, respectivamente; y para los sustratos glucosa y xilosa. El modelo incorpora la inhibición por sustrato en el crecimiento de biomasa y en la producción de bioetanol mediante una expresión de Monod modificada, mientras que la inhibición por producto se incorpora mediante un modelo de dos constantes.

Producto a partir de Glucosa

$$\frac{dP_g}{dt} = \frac{v_{\max_g} S_g}{K'_g + s_g + (s_g^2/K'_{i,g})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_g}{p'_{\max_g}} \right)^{\varphi_g} \right\} X \quad (59)$$

Producto a partir de Xilosa

$$\frac{dP_x}{dt} = \frac{v_{\max_x} S_x}{K'_x + s_x + (s_x^2/K'_{i,x})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_x}{p'_{\max_x}} \right)^{\varphi_x} \right\} X \quad (60)$$

Glucosa

$$\frac{dS_g}{dt} = -\frac{1}{Y_{p/s_g}} \frac{v_{\max_g} S_g}{K'_g + s_g + (s_g^2/K'_{i,g})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_g}{p'_{\max_g}} \right)^{\varphi_g} \right\} X \quad (61)$$

Xilosa

$$\frac{dS_x}{dt} = -\frac{1}{Y_{p/s_x}} \frac{v_{\max_x} S_x}{K'_x + s_x + (s_x^2/K'_{i,x})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_x}{p'_{\max_x}} \right)^{\varphi_x} \right\} X \quad (62)$$

El modelo de crecimiento de biomasa a partir de una mezcla de azúcares se describe con la ecuación (63), considerando que se produce competencia en la asimilación de los dos sustratos.

Biomasa

$$\frac{dX}{dt} = \left[\frac{s_g}{s_g + s_x} \frac{\mu_{\max_g} s_g}{K_g + s_g + (s_g^2/K_{i,g})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_g}{p_{\max_g}} \right)^{\phi_g} \right\} + \frac{s_x}{s_g + s_x} \frac{\mu_{\max_x} s_x}{K_x + s_x + (s_x^2/K_{i,x})} \left\{ 1 - \left(\frac{p_x}{p_{\max_x}} \right)^{\phi_x} \right\} \right] X \quad (63)$$

Las ecuaciones (64) y (65) representan la conversión de glucosa y xilosa con respecto a la concentración de azúcar en la alimentación (Chen & Wang, 2010).

Conversión de Glucosa

$$\chi_g = 1 - \frac{s_g}{\lambda s_f} \quad (64)$$

Conversión de Xilosa

$$\chi_x = 1 - \frac{s_g}{(1 - \lambda)s_f} \quad (65)$$

Este modelo consta de 23 parámetros, que se presentan en la Tabla 5 junto con su valor nominal. Los parámetros del modelo en las expresiones de inhibición por sustrato y por producto se determinaron a partir de experimentos con sustratos individuales por Krishnan *et al.* (1999).

La Figura 11 muestra esquemáticamente el proceso de co-fermentación. Las Figuras 12 a 15 presentan los perfiles temporales de concentración de sustrato (glucosa y xilosa), conversión, biomasa y producto, respectivamente.

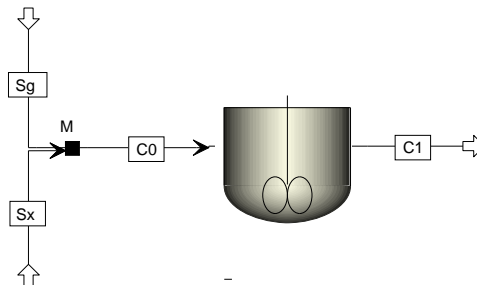
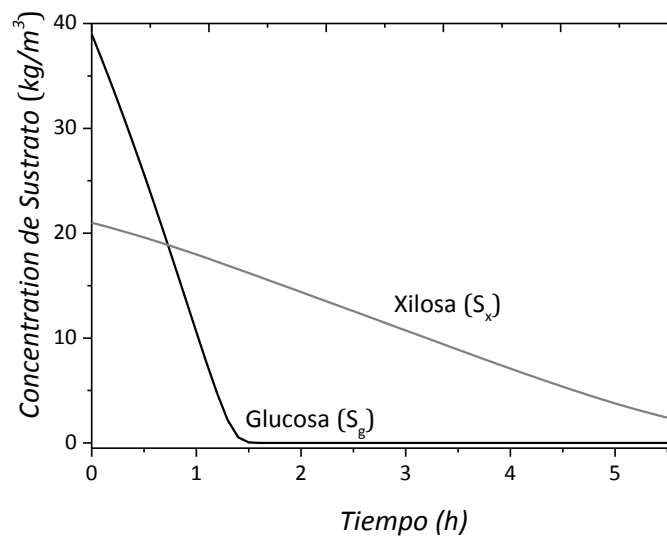


Figura 11. Esquema del co-fermentador del Modelo (iii).

Tabla 5. Descripción de los parámetros del modelo de Co-fermentación.

Parámetro	Descripción	Valor nominal		Unidad
		$j= \text{Glucosa}$	$j= \text{Xilosa}$	
μ_{maxj}	Velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa	0.662	0.190	h^{-1}
v_{maxj}	Velocidad específica máxima de la producción de etanol	2.005	0.250	h^{-1}
K_j	Coefficiente de saturación del crecimiento de biomasa	0.565	3.400	kg/m^3
$K_{i,j}$	Coefficiente de inhibición del crecimiento de biomasa	283.7	18.10	kg/m^3
K'_j	Coefficiente de saturación de la producción de etanol	1.342	3.400	kg/m^3
$K'_{i,j}$	Coefficiente de inhibición de la producción de etanol	4890	81.30	kg/m^3
p_{maxj}	Concentración máxima de etanol para el crecimiento de biomasa	95.40	59.04	kg/m^3
p'_{maxj}	Concentración máxima de etanol para la producción de etanol	103.0	60.20	kg/m^3
ϕ_j	Exponente de inhibición de etanol debida al crecimiento celular	1.290	1.036	-
φ_j	Exponente de inhibición de etanol debida a la producción de etanol	1.420	0.608	-
$Y_{p/sj}$	Coefficiente de rendimiento de producto	0.470	0.400	-
λ	Relación entre la concentración de glucosa y de azúcares en la alimentación	0.650		-

Referencia: Krishnan *et al.* (1999)**Figura 12.** Perfiles de concentración de los sustratos Glucosa (S_g) y Xilosa (S_x) del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.

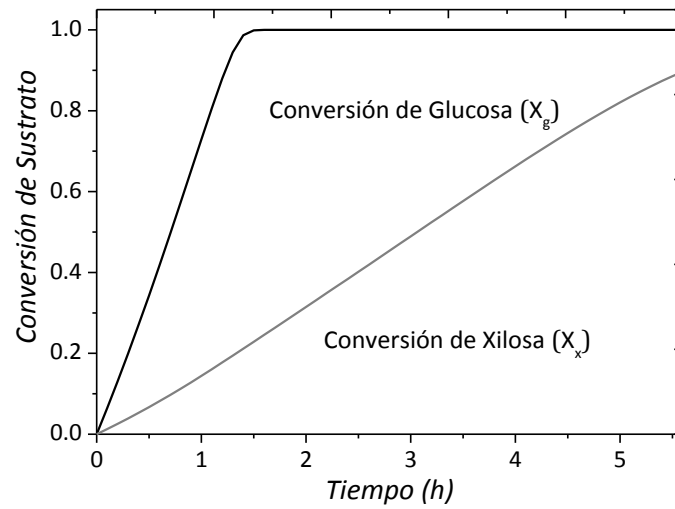


Figura 13. Perfiles de la conversión de Glucosa (χ_g) y Xilosa (χ_x) del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.

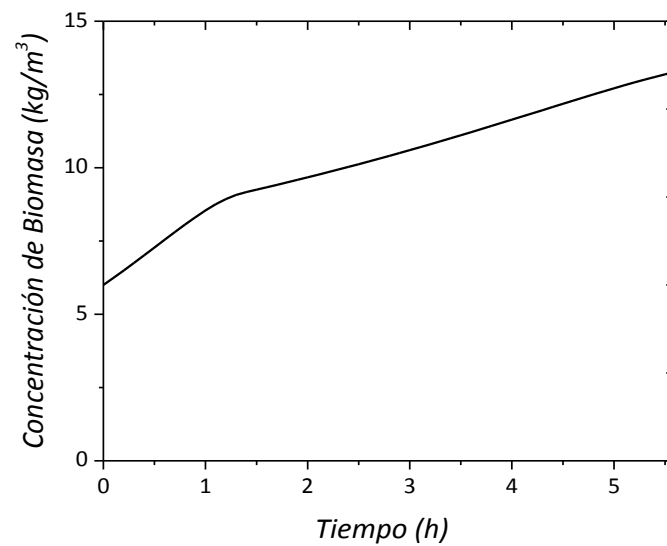


Figura 14. Perfiles de concentración de Biomasa del Modelo (iii), evaluados con los valores nominales de los parámetros.

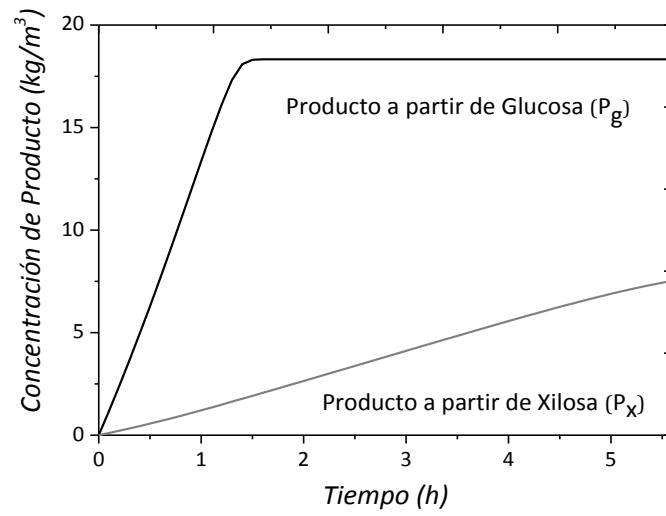


Figura 15. Perfiles de la concentración del Producto obtenido a partir de glucosa (P_g) y de xilosa (P_x) del Modelo (iii) evaluados con los valores nominales de los parámetros.

3.3 Análisis de Sensibilidad Global en Biorreactores y Redes de Biorreactores: Resultados Numéricos

Se llevó a cabo un análisis de sensibilidad global-dinámico en los modelos diferenciales algebraicos descritos en la Sección anterior. Los modelos fueron implementados utilizando un entorno de simulación orientado a ecuaciones, en gPROMS (PSEnterprise Ltd., 2014).

El modelo (i) tiene 5 parámetros cinéticos, 4 ecuaciones diferenciales y una algebraica; el modelo (ii) consta de 6 parámetros, 7 ecuaciones diferenciales y 14 algebraicas; mientras que en el modelo (iii) hay 23 parámetros, 5 ecuaciones diferenciales y dos algebraicas. Para los dos primeros modelos, el GSA se llevó a cabo sobre todos los parámetros cinéticos. En cambio, en el modelo (iii) se realizó un análisis de sensibilidad local sobre todo el set de parámetros del modelo para reducir el número de parámetros inciertos y así reducir también el costo computacional asociado, mientras que posteriormente se verificó que la selección era adecuada mediante el enfoque global. Solo se consideraron en el GSA los parámetros que tienen mayor impacto en las salidas del modelo: $\mu_{max,g}$, $\mu_{max,x}$, $v_{max,g}$, $v_{max,x}$, $Y_{p/s,g}$, $Y_{p/s,x}$ y λ . Se asociaron distribuciones de probabilidad normal a los parámetros inciertos. Los valores medios y desviaciones estándares fueron estimados con información de literatura, considerando los valores nominales de los parámetros como su valor medio y tomando un rango de variación de 12.5%. En general, éste representa un típico rango de variación de los parámetros. Las matrices de muestreo A , B y C_i se generaron para cada modelo diferencial algebraico en gPROMS para realizar las simulaciones estocásticas. La Tabla 6 muestra los parámetros de la distribución normal para cada parámetro incierto, así como el rango de variación de dichos parámetros en la bibliografía.

Tabla 6. Parámetros inciertos de los modelos cinéticos.

<i>Parámetro</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Sd.</i>	<i>Unidad</i>	<i>Rango Bibliografía</i>	<i>Variación</i>
<i>Modelo (i): Fermentador</i>				<i>Min.</i>	<i>Máx.</i>
μ_{max}	0.100 ^a	0.015	h ⁻¹	0.100 ^{c,d}	1.000 ^e
$Y_{x/s}$	0.124 ^a	0.020	-	0.001 ^d	0.550 ^e
$Y_{x/p}$	0.230 ^a	0.060	-	0.004 ^d	0.600 ^f
K_s	20.000 ^a	2.500	kg/m ³	0.010 ^d	20.000 ^a
v_{dead}	0.020 ^a	0.004	h ⁻¹		
<i>Modelo (ii): Red de Biorreactores</i>				<i>Min.</i>	<i>Máx.</i>
$\mu_{max,1}$	0.500 ^a	0.060	h ⁻¹	0.010 ^{c,d}	1.000 ^e
$\mu_{max,2}$	0.100 ^a	0.015	h ⁻¹	0.100 ^d	1.000 ^e
$Y_{x/s,2}$	0.124 ^a	0.020	-	0.001 ^d	0.550 ^e
$Y_{x/p}$	0.230 ^a	0.060	-	0.004 ^d	0.600 ^f
K_s^*	20.000 ^a	2.500	kg/m ³	0.010 ^d	20.000 ^a
v_{dead}^*	0.020 ^a	0.004	h ⁻¹		
<i>Modelo (iii): Cofermentador</i>				<i>Min.</i>	<i>Máx.</i>
$\mu_{max,g}$	0.662 ^b	0.083	h ⁻¹	0.010 ^{c,d}	1.000 ^e
$\mu_{max,x}$	0.190 ^b	0.024	h ⁻¹	0.017 ^d	0.417 ^f
$v_{max,g}$	2.005 ^b	0.251	h ⁻¹	2.005 ^b	5.120 ^g
$v_{max,x}$	0.250 ^b	0.031	h ⁻¹	0.250 ^b	3.080 ^d
$Y_{p/s,g}$	0.470 ^b	0.059	-	0.294 ^a	0.600 ^f
$Y_{p/s,x}$	0.400 ^b	0.05	-	0.350 ^h	0.796 ^d
λ	0.650 ^b	0.081	-		

(*) son parámetros comunes para ambos biorreactores de la red. Referencias: a: (Corsano *et al.*, 2004), b: (Krishnan *et al.*, 1999), c: (Todri *et al.*, 2014), d: (Moreno *et al.*, 2013), e: (Nielsen, Villadsen, & Lindén, 2003), f: (Nakamura, Sawada, & Inoue, 2011), g: (Leksawasdi, Joachimsthal, & Rogers, 2001), h: (Morales-Rodriguez, Gernaey, Meyer, & Sin, 2011).

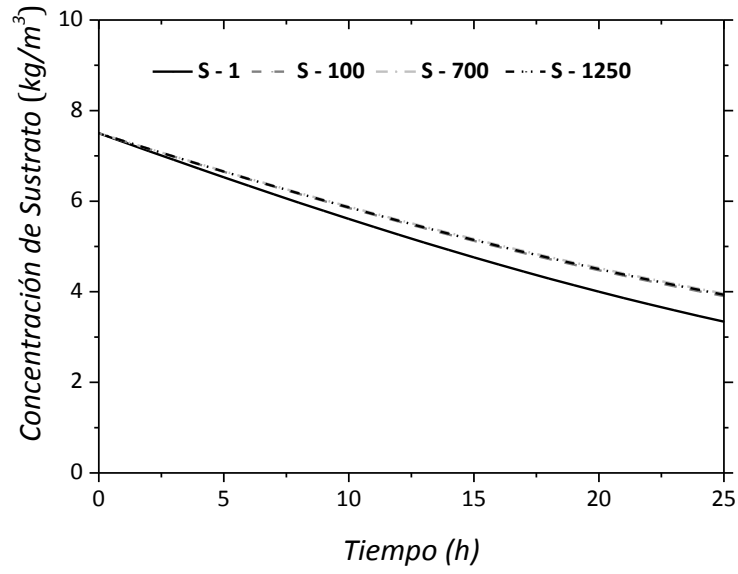
El número de escenarios para cada modelo se estimó realizando simulaciones estocásticas incrementando el número de escenarios ($N=1, 100, 700$ y 1250) hasta que los perfiles medios de las variables de estado permanecían constantes para un número de escenarios $N=1250$. Como puede observarse en los perfiles de las Figuras 16(a), 17(a) y 18 para la concentración de sustrato, de la Figura 20 para la conversión de sustrato, de las Figuras 22(a), 23(a), y 24(a) para la concentración de biomasa, y de las Figuras 25(a), 26(a), y 27 para la concentración de producto.

Se utilizó el software gPROMS para realizar las simulaciones estocásticas para los 1250 escenarios, y calcular las varianzas incondicionales y condicionales, así como los índices de sensibilidad de primer orden, de interacción y total de las variables de estado diferenciales y algebraicas de los modelos analizados.

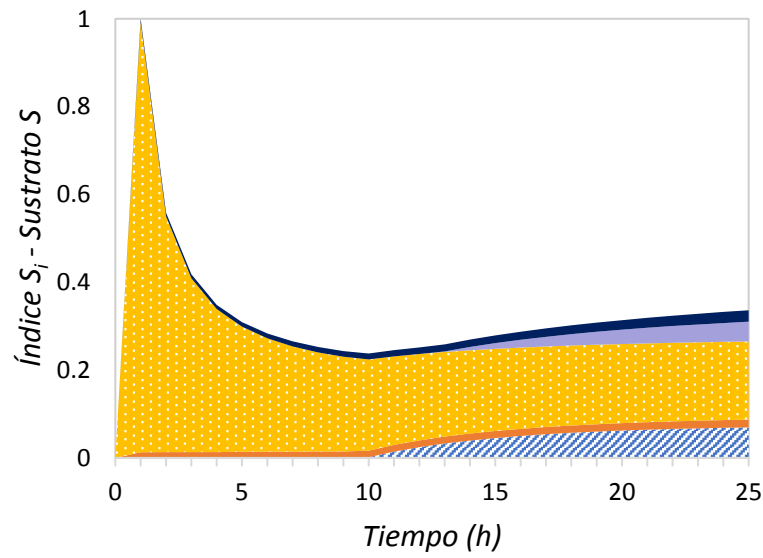
Los resultados obtenidos se presentan en gráficos acumulativos y tablas para los tres modelos estudiados en las siguientes secciones. Los gráficos acumulativos muestran los perfiles temporales de los índices de sensibilidad de primer orden (S_i), mientras que en las Tablas 7 a 9 se presentan los valores de los índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) a tres tiempos de reacción. En la siguiente discusión, se analiza cada variable de estado con respecto a los parámetros de cada modelo estudiado.

3.3.1 Concentración de Sustrato

En el modelo del fermentador (i), la concentración de sustrato S es principalmente influenciada a lo largo de todo el horizonte de tiempo por el parámetro μ_{max1} , que representa la velocidad específica máxima para el crecimiento de biomasa. Con este parámetro se explica entre el 20 y 100% de la varianza de dicha variable, con una mayor influencia al principio del proceso (Figura 16 (b) y Tabla 7). El coeficiente de rendimiento de biomasa explica hasta un 7% de la varianza al final del horizonte de tiempo. Su contribución es más relevante a través de sus interacciones con otros parámetros como puede verse en la Tabla 7 ($S_{i,int}$ entre 0.33 y 1.14).



(a)

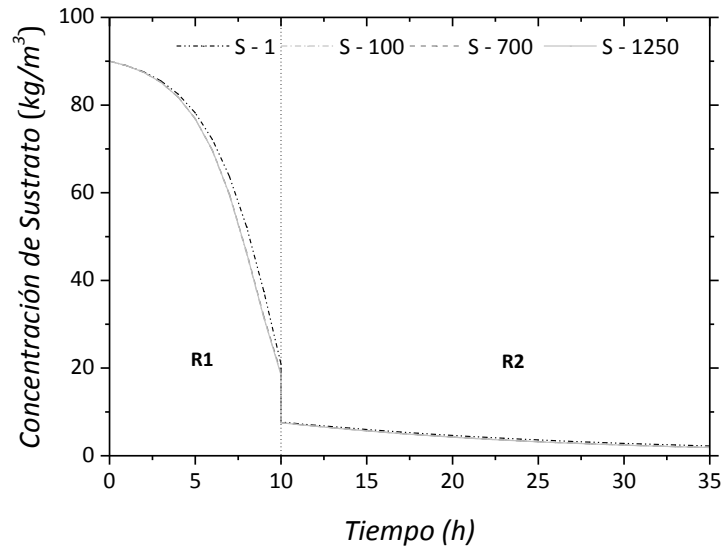


(b)

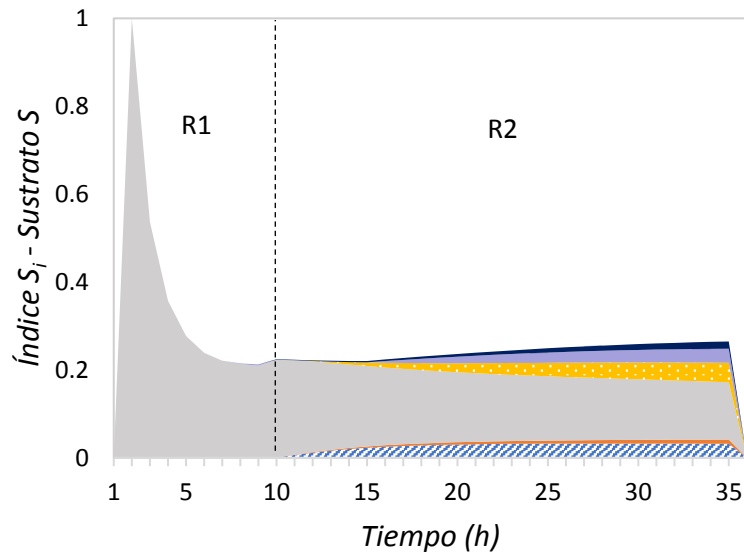
$Y_{x/s}$ $Y_{x/p}$ μ_{max} K_s v_{dead}

Figura 16. (a) Perfiles promedio de la concentración de Sustrato evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de sustratos en modelo (i): fermentador.

En el modelo (ii), la red de biorreactores, el parámetro más influyente para la concentración de sustrato (S) es nuevamente $\mu_{max,1}$, explicando entre el 25 y 100% de la varianza de S , siendo mayor al principio del proceso (Figura 17 (b)). Como puede



(a)



(b)

$Y_{x/s,2}$
 $Y_{x/p}$
 $\mu_{max,1}$
 $\mu_{max,2}$
 K_s
 v_{dead}

Figura 17. (a) Perfiles promedio de la concentración de Sustrato evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de Sustratos en modelo (ii): red de biorreactores.

apreciarse en la Tabla 7, $\mu_{max,1}$ también contribuye a la incertidumbre de la concentración de sustrato a través de sus efectos de interacción, logrando un valor de $S_{i,int}$ de 0.51 al final del horizonte de tiempo. El proceso de fermentación ocurre en el segundo biorreactor (R2), luego del tiempo $t=10$ h. Como puede observarse en la Figura 17(b), otros

parámetros adquieren algo de relevancia en esta etapa del proceso como $Y_{x/s,2}$ (el coeficiente de rendimiento de biomasa), $\mu_{max,2}$ (la velocidad específica máxima de crecimiento del fermentador) y K_s (la constante de saturación del sustrato). Estos resultados son consistentes con el hecho que el crecimiento de biomasa es el proceso principal del pre-fermentador (R1) y la concentración de biomasa (dependiente de la concentración del sustrato) también influye en el resto del proceso. En la Figura 17(b) y la Tabla 7 se puede observar que $Y_{x/s,2}$ es el segundo parámetro más influyente en sus efectos de primer orden después de 10 h y, al mismo tiempo, es el parámetro principal en relación a sus efectos de interacción a lo largo de todo el horizonte de tiempo. Sin embargo, la constante de saturación del sustrato, K_s , y la velocidad de muerte de la biomasa, v_{dead} , dominan los efectos de interacción en el primer biorreactor (R1). La presencia de efectos de interacción releva que el modelo es no-aditivo.

En el modelo (iii), correspondiente al cofermentador de glucosa y xilosa, hay una preferencia por parte de la levadura genéticamente modificada por el primer sustrato. La glucosa (S_g) se consume totalmente en el tiempo $t=1.5$ h, cuando solo el 20% de la xilosa (S_x) se ha consumido, como puede observarse en los perfiles medios de la Figura 18.

La Figura 19(a) muestra que hasta el tiempo $t=1.5$ h, los parámetros más relevantes son λ (la relación entre glucosa y la concentración de azúcares en la alimentación), $Y_{p/s,g}$ (el coeficiente de rendimiento de etanol) y $v_{max,g}$ (la velocidad específica máxima de formación de producto a partir de glucosa). Con estos tres parámetros se explica el 100% de la varianza de la concentración de glucosa. Para tiempos superiores a 1.5 h, solo se observan efectos de interacción entre parámetros (Tabla 7), siendo $Y_{p/s,g}$ y $v_{max,g}$ los parámetros más importantes junto con $\mu_{max,g}$ (la velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa a partir de glucosa).

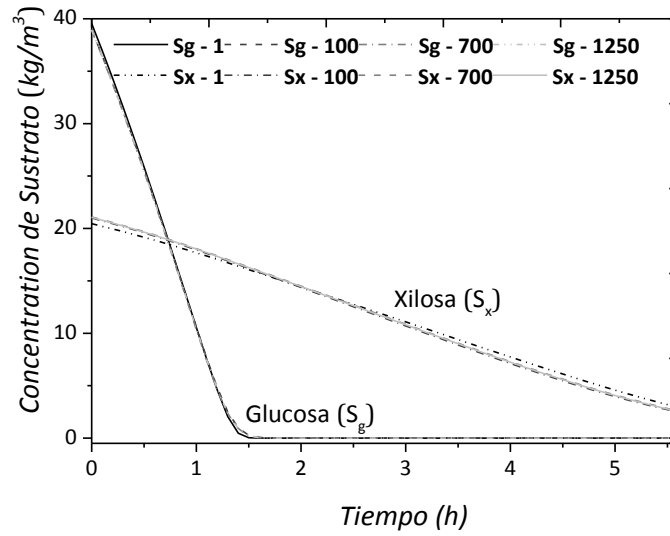


Figura 18. Perfiles promedio de la concentración de los sustratos Glucosa (S_g) y Xilosa (S_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250).

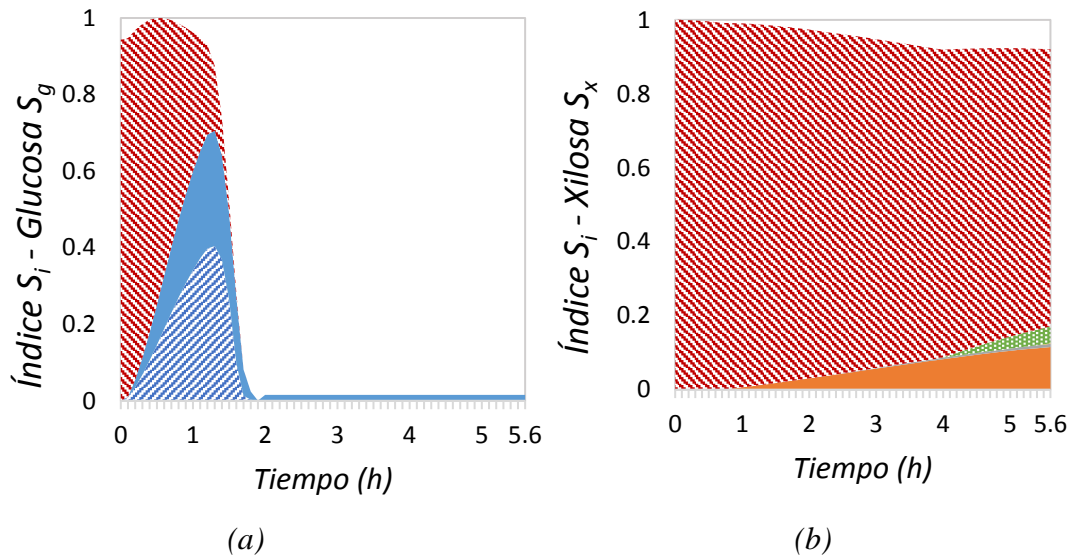


Figura 19. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de (a) glucosa y (b) xilosa del modelo (iii): cofermentador.

Para la concentración de xilosa (Figura 19(b)), el parámetro más influyente a lo largo de todo el horizonte de tiempo es λ , el cual explica casi el 100% de la varianza total. Para esta variable, los efectos de interacción entre los parámetros inciertos ($S_{i,int}$) son despreciables en comparación con los efectos de primer orden (S_i), como puede apreciarse

en la Figura 19(b) y en la Tabla 7. Por lo tanto, la varianza total para la concentración de xilosa puede explicarse solamente por los efectos de primer orden del parámetro λ .

Tabla 7. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de sustrato (S)

<i>Modelo (i)</i>						<i>Modelo (ii)</i>					
S						S					
S_i			$S_{i,int}$			S_i			$S_{i,int}$		
$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$
Y_{xs}		0.07	1.14	0.72	0.33	$Y_{xs,2}$		0.03	0.76		0.06
Y_{xp}	0.01	0.01	0.02			$Y_{xp,2}$		0.01	0.76		0.03
μ_{max}	0.54	0.28	0.18		0.05	$\mu_{max,1}$	1	0.28	0.15	0.2	0.51
K_s		0.05			0.11	$\mu_{max,2}$		0.03	0.76		0.10
v_{dead}	0.01	0.01	0.03			K_s		0.02	3.14	0.3	0.20
						v_{dead}		0.01	1.06	0.01	0.03
Σ	0.56	0.31	0.34				1.00	0.28	0.25		

<i>Modelo (iii)</i>											
S_g						S_x					
S_i			$S_{i,int}$			S_i			$S_{i,int}$		
$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$
$Y_{p/s,q}$	0.34			0.72	0.72						
$Y_{p/s,x}$			0.06	0.04	0.04	0.01	0.03	0.1			
$\mu_{max,g}$			0.05	0.36	0.36			0.01			
$\mu_{max,x}$			0.06								
$v_{max,g}$	0.26	0.01	0.01	0.06	0.87	0.87					
$v_{max,x}$				0.06	0.02	0.02		0.03	0.05	0.06	0.06
λ	0.36			0.14		0.98	0.94	0.78			
Σ	0.96	0.01	0.01			0.99	0.97	0.92			

Los sub-índices l , 2 , g y x representan el prefermentador, el fermentador, la glucosa y la xilosa, respectivamente. S_i y $S_{i,int}$ representan los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para el parámetro i . t es el tiempo (h). Los mayores valores de los índices están marcados en negrita.

3.3.2 Conversión de Glucosa y Xilosa

En esta sección, se analizan los perfiles temporales de los índices de sensibilidad correspondientes a la conversión de glucosa, χ_g , y de xilosa, χ_x , las dos variables de estado algebraicas del modelo (iii).

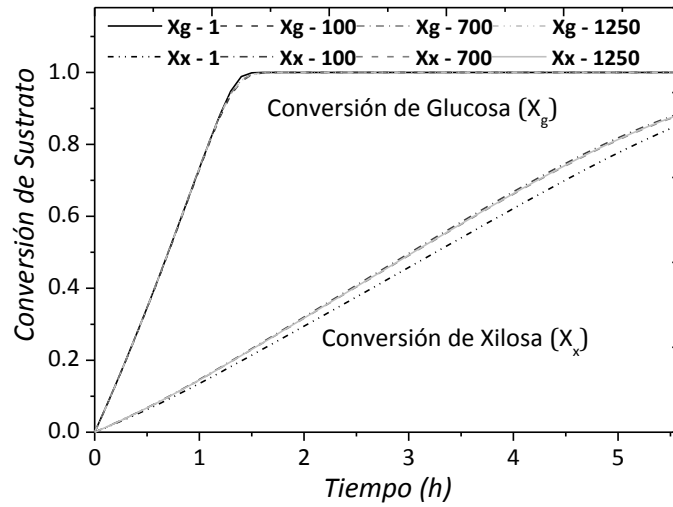


Figura 20. Perfiles promedio de la conversión de Glucosa (X_g) y Xilosa (X_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250).

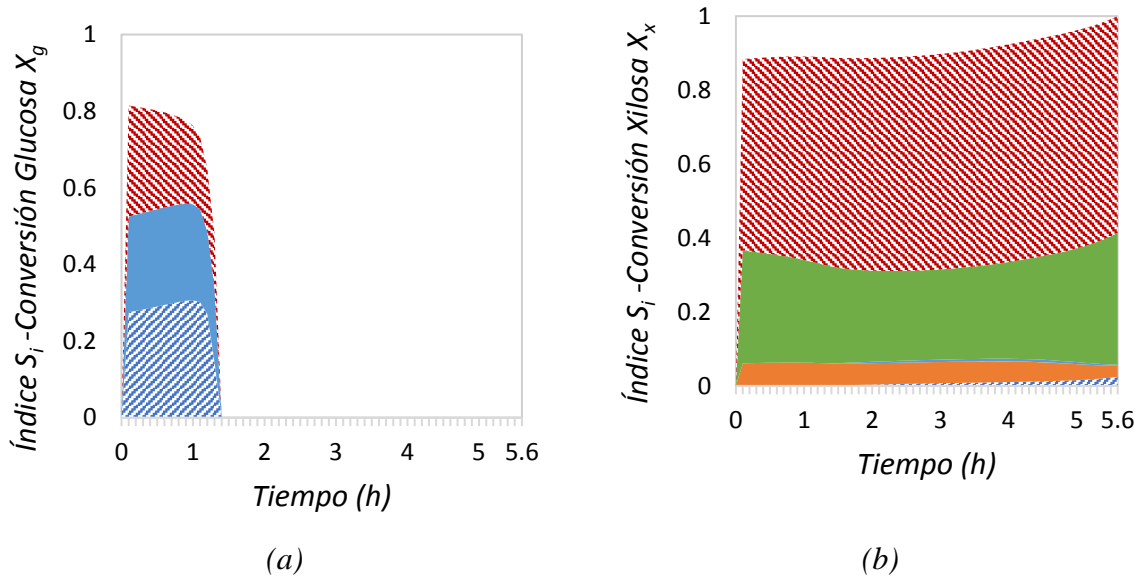


Figura 21. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden de la conversión de (a) glucosa y (b) xilosa del cofermentador.

Los gráficos acumulativos del perfil temporal del índice de sensibilidad de primer orden de la conversión de glucosa se muestran en la Figura 21(a). Hay solo tres parámetros relevantes que contribuyen hasta un 80% de la varianza de la conversión de glucosa para $t < 1.5$ h: $Y_{p/s,g}$, λ , y $v_{max,g}$. Este efecto se desvanece cuando se consume toda la glucosa. Los efectos de interacción son totalmente despreciables para esta variable.

En la Figura 21 (b) se muestran los perfiles del índice de sensibilidad de primer orden para la conversión de xilosa. λ y $v_{max,x}$ contribuyen en un 60% y 30% , respectivamente, a la varianza de salida. Mientras que $Y_{p/s,x}$ explica un 6% de la incertidumbre de la conversión de xilosa durante todo el tiempo operativo

3.3.3 Concentración de Biomasa

Los perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de biomasa (X) se muestran en las Figuras 22(b), 23(b) y 24(b). En el modelo (i), los efectos de primer orden contribuyen en un 50% de la varianza de la concentración de biomasa, siendo K_s el parámetro más influyente al principio del proceso, seguido por v_{dead} que aporta entre un 10 y 27% al principio y al final del horizonte de tiempo, respectivamente (Figura 22(b) – Tabla 8). El parámetro μ_{max} contribuye con un 6% a través de los efectos de primer orden, pero es el más importante en relación a su contribución a la varianza de salida a través de sus efectos de interacción con otros parámetros, con un valor de $S_{i,int}$ de hasta 0.65. Los coeficientes de rendimiento de biomasa y producto contribuyen un bajo porcentaje a la varianza debido a los efectos de primer orden y directamente no influyen por sus efectos de interacción. Por lo tanto, estos dos parámetros se pueden considerar como los menos influyentes en la concentración de biomasa del modelo (i).

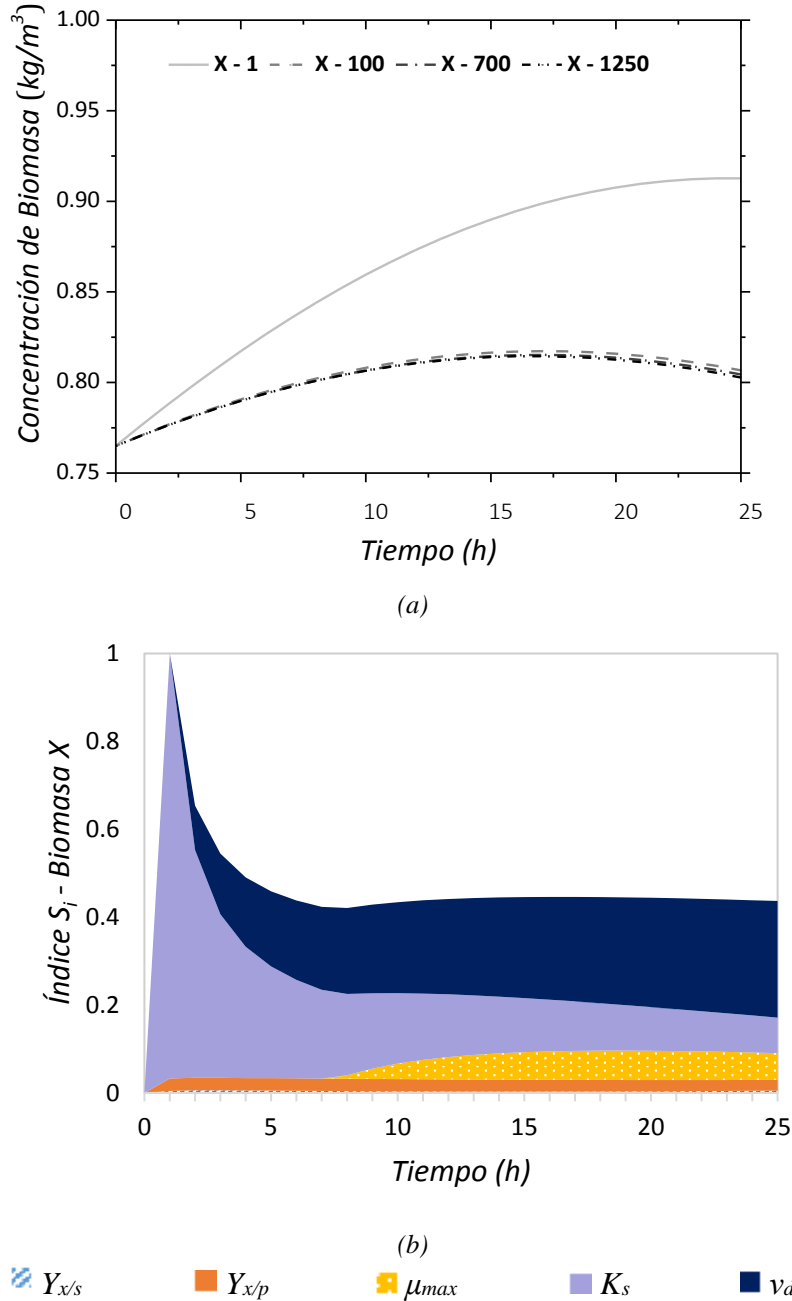
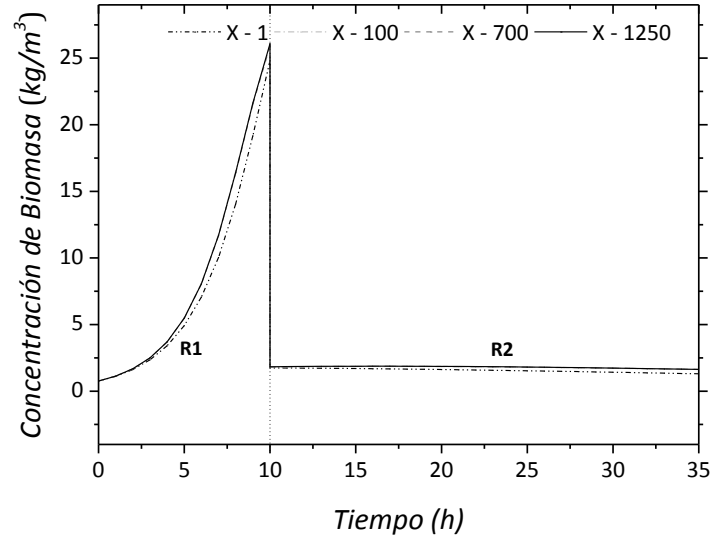


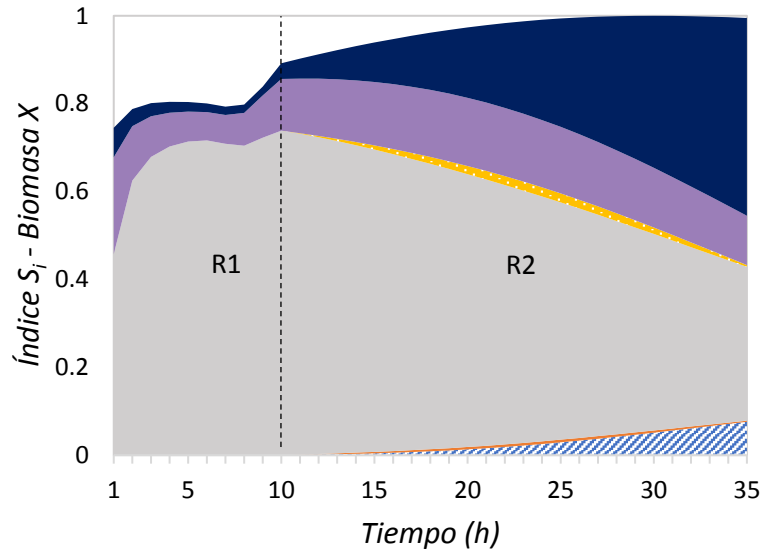
Figura 22. (a) Perfiles promedio de la concentración de Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración biomasa en modelo (i): fermentador.

En el modelo (ii), los efectos de primer orden explican entre el 79 y 100% de la varianza de la concentración de biomasa como puede verse en la Figura 23(b) y en la Tabla 8. La velocidad específica máxima de crecimiento de biomasa, $\mu_{max,1}$, contribuye entre 54 y 71% a la varianza de dicha variable, seguido por v_{dead} que cobra importancia en etapas

posteriores del proceso. K_s es también un parámetro importante del proceso (S_i alrededor de 0.15).



(a)



(b)

Figura 23. (a) Perfiles promedio de la concentración Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración Biomasa en modelo (ii): red de biorreactores.

En relación con los efectos de interacción, el índice de sensibilidad de interacción para $\mu_{max,1}$ toma valores entre 0.38 y 0.54. Se puede concluir que $\mu_{max,1}$ es el parámetro más

influyente de la red de biorreactores, mientras que las contribuciones de los coeficientes de rendimiento tanto de biomasa como de producto ($Y_{x/s}$, $Y_{x/p}$) son despreciables.

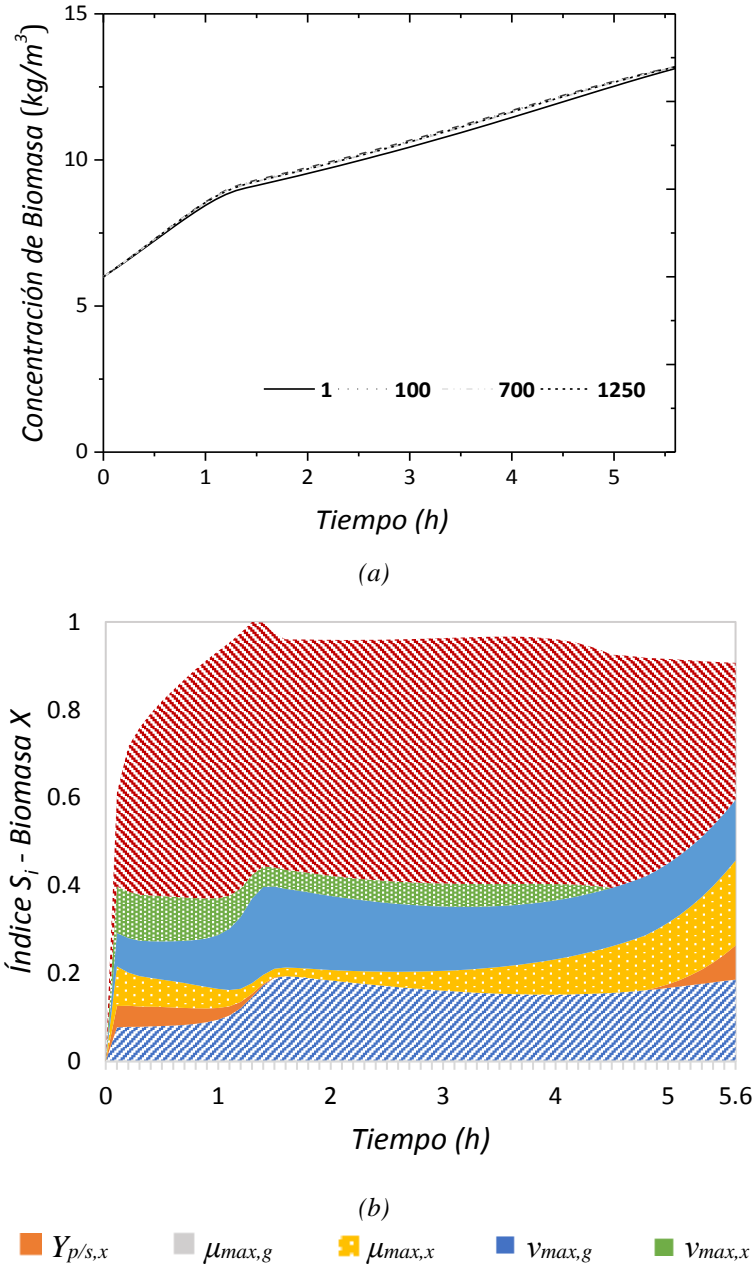


Figura 24. (a) Perfiles promedio de la concentración de Biomasa evaluados con distinto número de escenarios ($N=1$, 100, 700, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración biomasa en modelo (iii): cofermentador.

Por otro lado, en el sistema de cofermentación (modelo (iii)), el parámetro más influyente es nuevamente λ , explicando más de un 50% de la varianza de la concentración de

biomasa a lo largo de todo el horizonte de tiempo; $v_{max,g}$ y $Y_{p/s,g}$ también contribuyen hasta un 30% de la varianza (Figura 24(b) y Tabla 8). Los efectos de interacción son despreciables para esta variable.

Tabla 8. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de biomasa (X)

	<i>Modelo (i)</i>						<i>Modelo (ii)</i>						
	X						X						
	S_i			$S_{i,int}$			S_i			$S_{i,int}$			
	$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$	$t=2$	$t=5$	$t=25$	
Y_{xs}	0.01	0.01	0.01				$Y_{xs,2}$		0.03		0.02	0.05	
Y_{xp}	0.03	0.03	0.02				$Y_{xp,2}$		0.01		0.02	0.09	
μ_{max}			0.06	0.65	0.42	0.06	$\mu_{max,1}$	0.63	0.71	0.54	0.54	0.4	0.38
K_s	0.52	0.25	0.08				$\mu_{max,2}$		0.02		0.02	0.1	
v_{dead}	0.10	0.17	0.27			0.11	K_s	0.12	0.07	0.15			
							v_{dead}	0.04	0.02	0.25			
Σ	0.65	0.46	0.44					0.79	0.80	1.00			

	<i>Modelo (iii)</i>					
	X					
	S_i			$S_{i,int}$		
	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$
$Y_{p/s,q}$	0.09	0.2	0.2			
$Y_{p/s,x}$	0.03		0.01			
$\mu_{max,g}$				0.14	0.13	0.15
$\mu_{max,x}$	0.04	0.02	0.14			
$v_{max,g}$	0.12	0.2	0.14			
$v_{max,x}$	0.08	0.05				
λ	0.56	0.5	0.5			
Σ	0.92	0.96	0.93			

Los sub-índices l , 2 , g y x representan el prefermentador, el fermentador, la glucosa y la xilosa, respectivamente. S_i y $S_{i,int}$ representan los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para el parámetro i . t es el tiempo (h). Los mayores valores de los índices están marcados en negrita.

3.3.4 Concentración de Bioetanol

En el modelo (ii), los perfiles de los índices de sensibilidad de la concentración de bioetanol se analizan a partir de tiempo $t=10$ h, considerando solamente el segundo biorreactor de la red donde se lleva a cabo la fermentación. La concentración de bioetanol

para los modelos (i) (Figura 25(b)) y (ii) (Figura 26(b)) se ve influenciada principalmente por los efectos de primer orden explicando alrededor del 100% y entre el 68 y 100% de la varianza del producto, respectivamente.

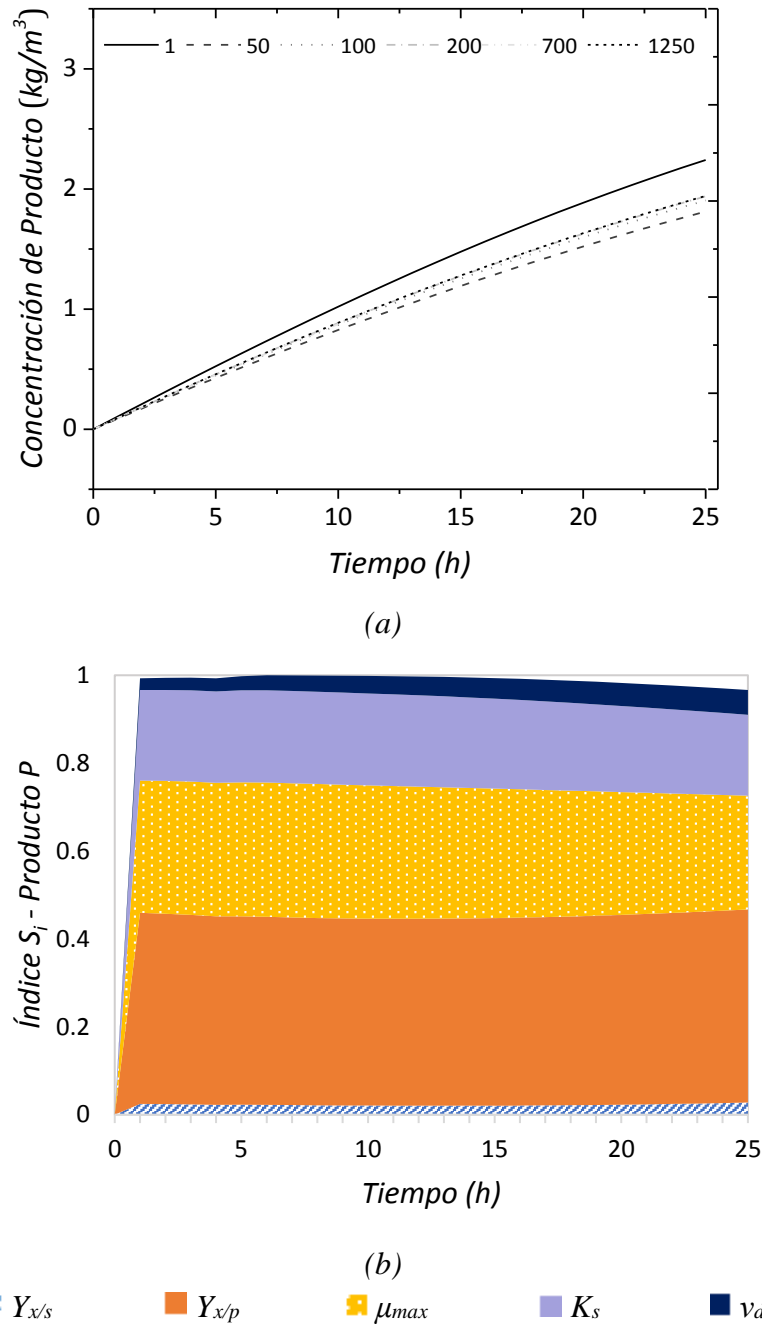


Figura 25. (a) Perfiles promedio de la concentración de Producto evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 50, 100, 200, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto en modelo (i): fermentador.

En el primer modelo, $Y_{x/p}$ es el parámetro más influyente seguido por μ_{max} y K_s . Estos tres parámetros son influyentes a lo largo de todo el proceso de fermentación. Además, μ_{max} es influyente a través de sus interacciones con otros parámetros, con valores de $S_{i,int}$ entre 0.21 y 0.28 (Tabla 9).

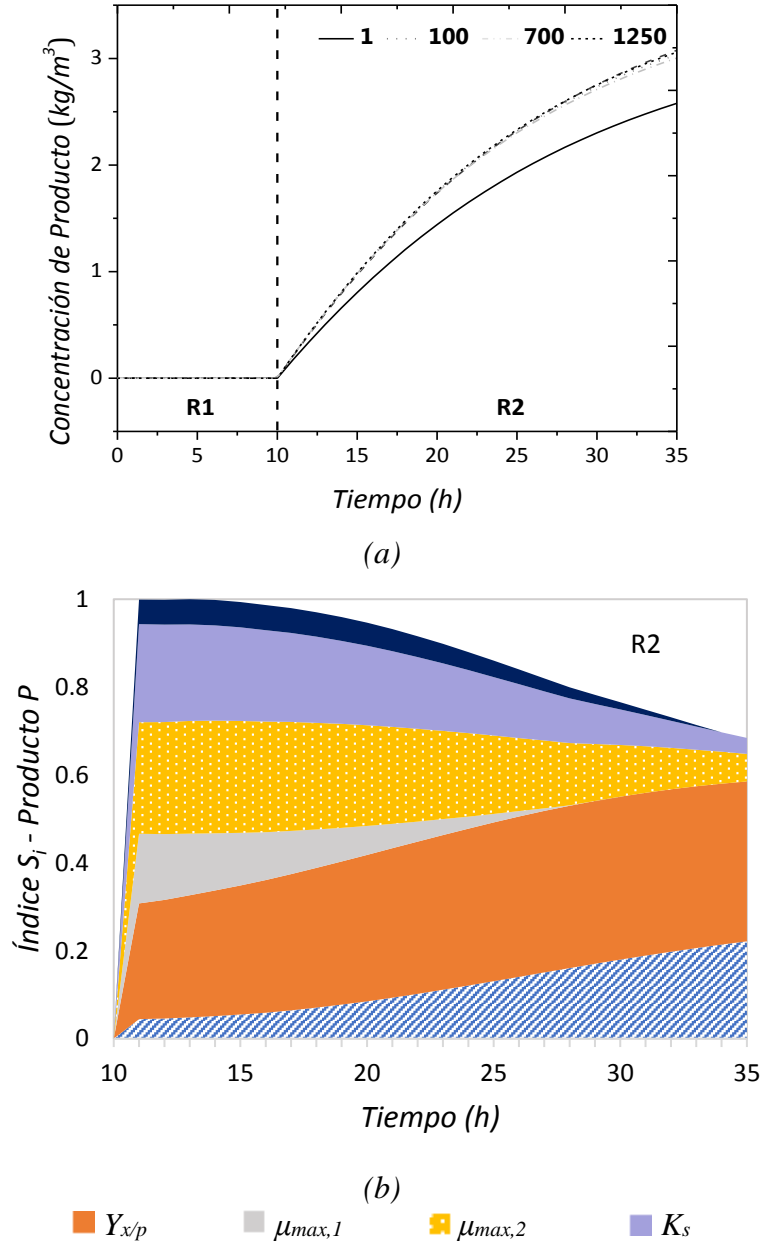


Figura 26. (a) Perfiles promedio de la concentración de Producto evaluados con distinto número de escenarios ($N=1, 100, 700$, y 1250) y (b) perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto en modelo (ii): red de biorreactores.

El modelo (ii), $Y_{x/p}$ es el parámetro principal a lo largo de todo el horizonte de tiempo y contribuye entre 30 y 40 % a la varianza total de la concentración de bioetanol, como se puede observar en la Figura 26(b) y en la Tabla 9. K_s y $\mu_{max,2}$ también son parámetros importantes, juntos suman valores de S_i entre 0.49 y 0.1, y cuya relevancia disminuye hacia el final del proceso. En cambio, la influencia de $Y_{x/s,2}$, crece a lo largo del horizonte de tiempo. Además, $\mu_{max,1}$ y v_{dead} tienen algo de influencia solo al principio de la etapa de fermentación. Por otro lado, los efectos de interacción toman importancia en la última parte del proceso, siendo $\mu_{max,1}$ y μ_{max} los parámetros más influyentes, sumando juntos valores de $S_{i,int}$ entre 0.5 y 0.8 (Tabla 9).

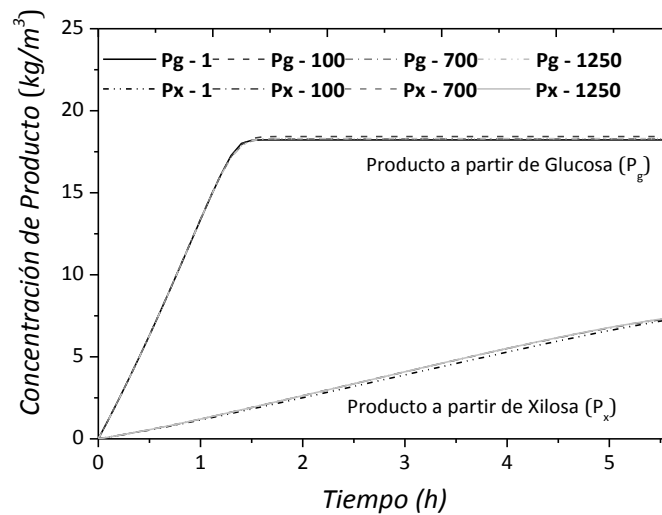


Figura 27. Perfiles promedio de la concentración de la concentración del Producto obtenido a partir de glucosa (P_g) y de xilosa (P_x) del Modelo (iii), evaluados con distinto número de escenarios ($N=1$, 100, 700, y 1250).

En el modelo (iii), la concentración de bioetanol se representa con dos variables de estado diferenciales: bioetanol producido a partir de glucosa, P_g , y a partir de xilosa, P_x . El modelo captura la alta velocidad de producción de bioetanol durante la etapa inicial de fermentación de glucosa, seguida por una velocidad menor a partir de xilosa. El modelo también predice la utilización simultánea de ambos sustratos. Antes de que se consuma

totalmente la glucosa (en el $t=1.5$ h), la velocidad específica máxima de producción de etanol a partir de glucosa, $v_{max,g}$, es el parámetro más importante debido a sus efectos de primer orden, explicando más del 75% de la varianza total (Figura 28 (a) y Tabla 9). También es un parámetro influyente a través de sus interacciones con otros parámetros ($S_{i,int}=0.13$). Para tiempos mayores a 1.5 h, $Y_{p/s,g}$ y λ explican un 96% de la varianza de la concentración de bioetanol producido a partir de glucosa (P_g) debido a los efectos de primer orden. En el caso de la concentración de bioetanol a partir de xilosa, (P_x), el perfil de S_i muestra que los efectos de primer orden explican alrededor de un 70% de la varianza de salida, siendo $v_{max,x}$ el parámetro más influyente con contribuciones desde 56 a 77% de la varianza a lo largo de todo el tiempo de operación. Como puede verse en las Figura 28 (a) y (b), los perfiles de los índices de sensibilidad para P_x son más suaves que para P_g , de acuerdo con la menor velocidad de conversión de la xilosa.

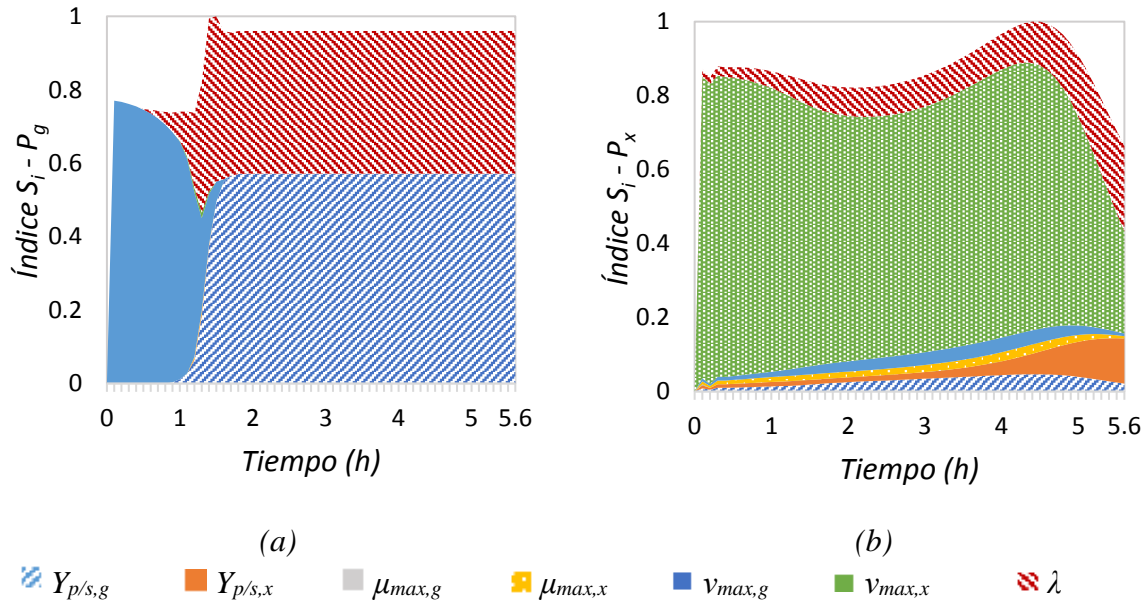


Figura 28. Perfiles del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de producto (a) a partir de glucosa y (b) de xilosa del modelo (iii): cofermentador.

Tabla 9. Índices de sensibilidad de primer orden (S_i) y de interacción ($S_{i,int}$) para la concentración de producto (P)

	<i>Modelo (i)</i>							<i>Modelo (ii)</i>					
	<i>P</i>							<i>P</i>					
	<i>S_i</i>			<i>S_{i,int}</i>				<i>S_i</i>			<i>S_{i,int}</i>		
	<i>t=2</i>	<i>t= 5</i>	<i>t=25</i>	<i>t=2</i>	<i>t=5</i>	<i>t=25</i>		<i>t=15</i>	<i>t=25</i>	<i>t=35</i>	<i>t=15</i>	<i>t=25</i>	<i>t=35</i>
<i>Y_{xs}</i>	0.02	0.02	0.03	0.02	0.02	0.05	<i>Y_{xs,2}</i>	0.05	0.13	0.22	0.14	0.14	0.13
<i>Y_{xp}</i>	0.43	0.43	0.44				<i>Y_{xp,2}</i>	0.29	0.36	0.36	0.07	0.10	0.13
<i>μ_{max}</i>	0.30	0.31	0.26	0.28	0.27	0.21	<i>μ_{max,1}</i>	0.12	0.02		0.23	0.32	0.38
<i>K_s</i>	0.21	0.21	0.18				<i>μ_{max,2}</i>	0.25	0.18	0.06	0.25	0.34	0.39
<i>v_{dead}</i>	0.03	0.03	0.06	0.01			<i>K_s</i>	0.21	0.13	0.04	0.06	0.14	0.22
							<i>v_{dead}</i>	0.06	0.04		0.13	0.18	0.25
Σ	0.99	1.00	0.97					0.98	0.86	0.68			

	Modelo (iii)											
	P_g						P_x					
	S_i			$S_{i,int}$			S_i			$S_{i,int}$		
	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$	$t=1$	$t=2$	$t=5$
$Y_{p/s,q}$	0.01	0.57	0.57				0.01	0.02	0.04	1.1	1.0	1.3
$Y_{p/s,x}$					0.13	0.13	0.01	0.01	0.09	1.1	1.0	1.2
$\mu_{max,g}$					0.13	0.13				1.3	1.2	1.6
$\mu_{max,x}$					0.13	0.13	0.01	0.02	0.02	1.1	1.0	1.3
$v_{max,g}$	0.65			0.05	0.13	0.13	0.01	0.03	0.03	1.1	1.0	1.3
$v_{max,x}$					0.13	0.13	0.77	0.66	0.56			0.2
λ	0.08	0.39	0.39		0.3	0.3	0.05	0.08	0.17	1.2	1.1	1.2
Σ	0.74	0.96	0.96				0.86	0.82	0.91			

Los sub-índices 1 , 2 , g y x representan el pre-fermentador, el fermentador, la glucosa y la xilosa, respectivamente. S_i y $S_{i,int}$ representan los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para el parámetro i . t es el tiempo (h). Los mayores valores de los índices están marcados en negrita.

3.4 Conclusiones

En este capítulo se llevó a cabo un análisis de sensibilidad global dinámico y paramétrico en tres modelos de complejidad creciente para la producción de bioetanol. Los resultados numéricos muestran que el costo computacional elevado del GSA en modelos complejos se justifica ampliamente ya que se pueden captar no solo los efectos de primer orden, sino que también los efectos de interacción entre los parámetros del modelo. Los perfiles temporales de los índices de sensibilidad relacionados con cada parámetro permitieron la

identificación de los parámetros más influyentes en las variables del modelo a lo largo de todo el horizonte de tiempo. En el modelo (i), μ_{max} y K_s fueron los parámetros más influyentes, seguidos por v_{dead} and $Y_{x/s}$. En el modelo (ii), el parámetro con mayor contribución a la incertidumbre del modelo fue $\mu_{max,1}$, tanto a través de sus efectos de primer orden como de sus efectos de interacción. En el caso más complejo, el modelo de cofermentación (modelo (iii)), el GSA permitió determinar que el parámetro que describe la relación entre la concentración de glucosa y concentración de azúcares en la alimentación λ es el parámetro más influyente debido a sus efectos de interacción y de primer orden a lo largo de todo el horizonte de tiempo. Un conocimiento adecuado de la influencia de los parámetros del modelo sobre las variables de estado permite su clasificación y provee información útil para la estimación de parámetros en los biorreactores y en las redes de biorreactores.

MODELADO DE SISTEMAS DE LAGUNAS DE TRATAMIENTO BIOLÓGICO DE AGUAS RESIDUALES

4.1 Introducción

En este Capítulo se proponen modelos dinámicos de lagunas de estabilización, tanto anaeróbicas como aeróbicas y facultativas. Basado en dichos modelos, en esta sección se compara la eficiencia de diferentes configuraciones de los sistemas de tratamiento biológico. Asimismo, en el Capítulo 5 se lleva a cabo análisis de sensibilidad global para determinar los parámetros más influyentes del modelo y en el 6 se formula un problema de diseño óptimo de la red.

Se estudia el comportamiento dinámico de sistemas de lagunas de estabilización con distintas configuraciones, a fin de comparar sus eficiencias. Una configuración posible y aceptada consiste en dos lagunas aeróbicas en serie seguidas por una facultativa. Dicha configuración es utilizada en una planta de tratamiento de aguas residuales de la industria juguera (Iturmendi, Estrada, Ochoa, Hoch, & Diaz, 2012). La otra configuración es la convencional, de tres lagunas en serie: anaeróbica, facultativa y aeróbica, como se muestra en la Figura 29. El modelado dinámico de cada pileta, basado en primeros principios de conservación de la materia, se simula durante un período de cuatro meses.

En cada laguna se formulan los balances de masa para biomasa, nutrientes, oxígeno disuelto y los distintos tipos de materia orgánica. Esto da lugar a un complejo sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales y algebraicas (PDAE). En el caso de las lagunas aeróbicas y anaeróbicas se consideran condiciones homogéneas en todo el volumen, mientras que en las lagunas facultativas se consideran dos capas horizontales, suponiendo que en cada capa las condiciones son homogéneas. De esta manera, se obtiene un sistema diferencial a derivadas totales en lugar de parciales. Por otro lado, los procesos de sedimentación no se tienen en cuenta debido a la etapa de separación primaria anterior en los tamices rotativos. El modelo permite estudiar la dinámica del proceso utilizado para estimar la calidad del efluente, para distintas configuraciones y condiciones operativas.

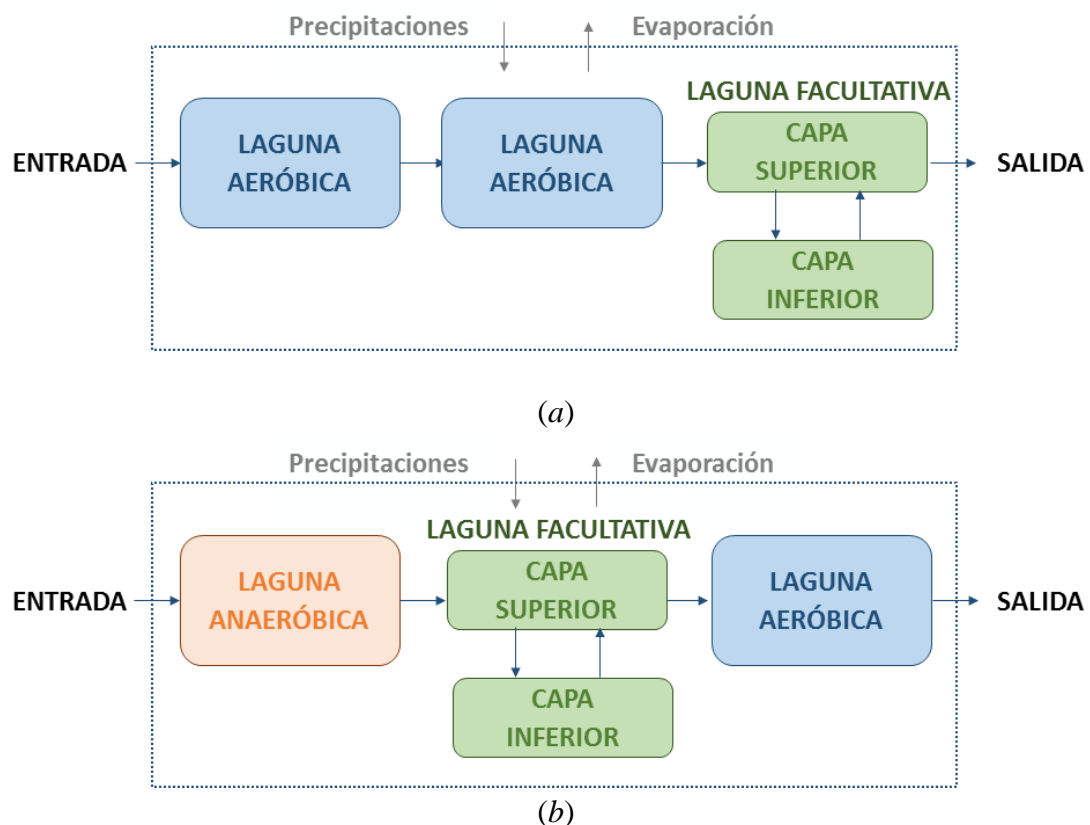


Figura 29. Configuración (a) adoptada en una empresa juguera del país y (b) convencional para el sistema de lagunas.

4.2 Modelo Dinámico

El sistema diferencial-algebraico de ecuaciones representa un sistema de tres lagunas en serie para el tratamiento biológico de aguas residuales. La Figura 30 presenta un diagrama de los procesos involucrados en el modelo biogeoquímico de la laguna facultativa, que incluye tanto los procesos aeróbicos como anaeróbicos.

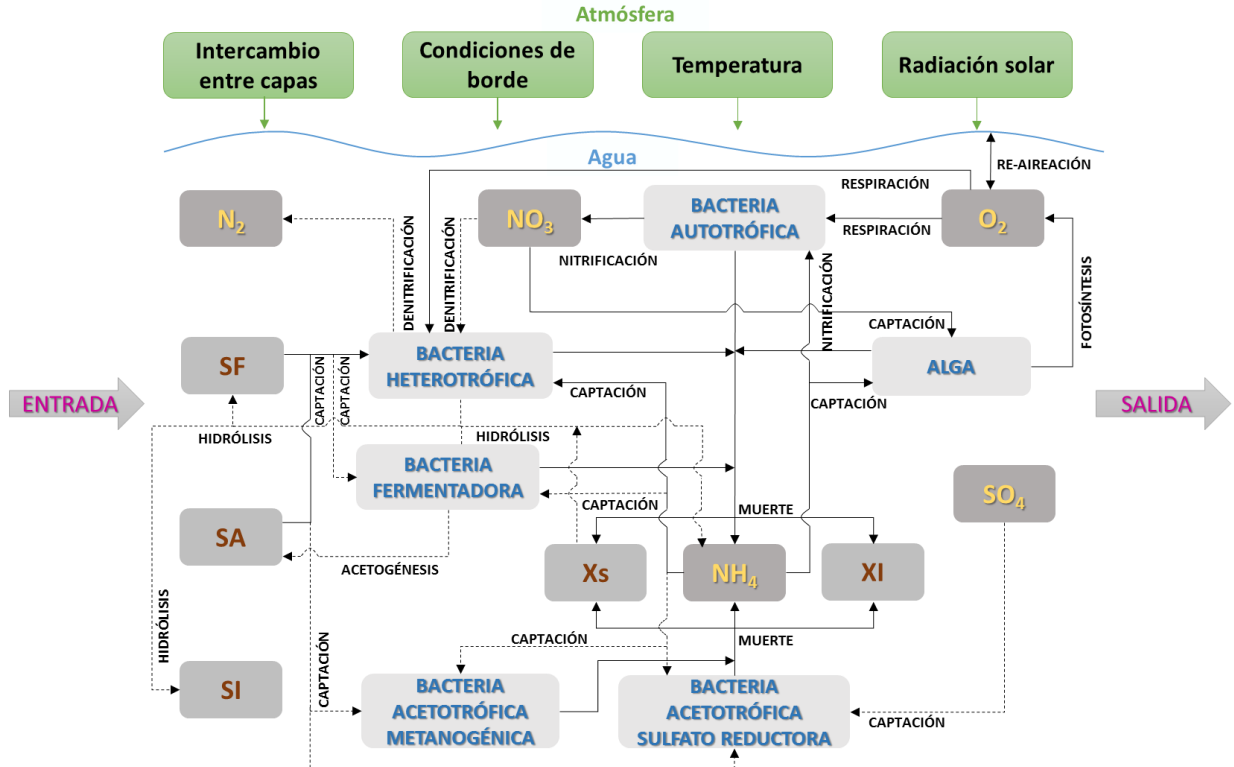


Figura 30. Esquema del modelo de la laguna facultativa. → indica los procesos aeróbicos; - → indica los procesos anaeróbicos.

El modelo incluye balances de masa para los grupos predominantes de bacterias: heterotróficas, autotróficas, fermentadoras, acetotróficas metanogénicas y acetotróficas sulfato reductoras, biomasa algal, las distintas fuentes de materia orgánica y los principales nutrientes. Los balances incluyen la acumulación, las entradas, las salidas, la generación o consumo, la transferencia entre capas y la variación del volumen por el cambio de altura.

$$\frac{dC_{x,ij}}{dt} = \frac{Q_i^{in} \cdot C_{x,i}^{in} - Q_i^{out} \cdot C_{x,ij}}{V_{ij}} + F_{x,ij} - \frac{k_m A_i}{\Delta h_{ij} \cdot V_{ij}} \cdot (C_{x,ij} - C_{x,ij+1}) - \frac{C_{x,ij}}{h_{ij}} \cdot \frac{dh_{ij}}{dt} \quad (66)$$

$j = 1$

$$\frac{dC_{X,ij}}{dt} = F_{X,ij} + \frac{k_m A_i}{\Delta h_{ij} \cdot V_{ij}} \cdot (C_{X,ij-1} - C_{X,ij}) \quad (67)$$

$j = 2$

$$\frac{dV_i}{dt} = Q_i^{in} - Q_i^{out} + Q_i^{prec} - Q_i^{evap} \quad (68)$$

$X = DQO, SA, SF, SI, XI, Xs, N_2, NH_4, NO_3, O_2, SO_4, alg, amb, asrb, ab, Ecoli, fb, hb$
 $i = \text{laguna}; j = \text{capa}$

Los subíndices i, j , y X hacen referencia a la pileta, la capa, y la variable relacionada con la biomasa, los nutrientes y la carga orgánica (Tabla 10), respectivamente. Q_i^{in} , Q_i^{out} , Q_i^{prec} y Q_i^{evap} representan los caudales volumétricos (m^3/d). $C_{X,ij}$ es la concentración del componente X en la laguna i en la capa j (gx/m^3). V_{ij} es el volumen de la capa j en la laguna i (m^3). A_i (m^2) y h_i (m) son el área transversal y la altura de la columna de agua, respectivamente. Δh (m) es la distancia entre la mitad de la capa superior y la mitad de la capa inferior y k_m es el coeficiente de transferencia de masa entre capas en la laguna facultativa. $F_{X,i,j}$ corresponde a la generación neta de X en la laguna i y en capa j . La laguna facultativa consta de dos capas para distinguir las zonas aerobia y anaerobia que se forman dentro de la laguna.

El último término de la ecuación (66) corresponde a la variación de volumen de la laguna. Se ha formulado también un balance de masa global (ec. (68)) que tiene en cuenta además de los caudales de entrada y salida, las entradas por lluvias (Q_i^{prec}) y salidas por evaporación (Q_i^{evap}).

Tabla 10. Variables diferenciales del modelo del sistema de lagunas de estabilización.

Tipo	Variable	Descripción	Unidad
CARGA ORGÁNICA	$C_{DQO,ij}$	<i>Demanda Química de Oxígeno (DQO)</i> <i>Productos de la fermentación.</i> Se considera que todos los productos de la fermentación son solamente acetato.	gDQO/m ³
	$C_{SA,ij}$	Su remoción se debe al crecimiento aeróbico y anóxico de las bacterias heterotróficas, así como al crecimiento anaeróbico de las bacterias acetotróficas.	gDQO/m ³
	$C_{SF,ij}$	<i>Sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación.</i> Esta fracción de DQO está directamente disponible para su biodegradación por las bacterias heterotróficas y fermentadoras, y se produce durante la hidrólisis.	gDQO/m ³
	$C_{SI,ij}$	<i>Materia orgánica soluble inerte</i> , forma parte de la carga orgánica del influente, no puede ser degradado en la planta de tratamiento y se puede producir durante la hidrólisis.	gDQO/m ³
	$C_{XI,ij}$	<i>Materia orgánica particulada inerte.</i> Esta parte de la materia orgánica no se degrada y se produce por la muerte de los distintos grupos de bacteria y algas.	gDQO/m ³
	$C_{Xs,ij}$	<i>Sustrato particulado lentamente biodegradable.</i> Representa las sustancias orgánicas que deben ser hidrolizadas por las bacterias heterotróficas (sometidas a hidrólisis) para estar disponibles para su degradación. Cuando las bacterias mueren, las partes biodegradables de las células contribuyen a esta cantidad.	gDQO/m ³
NUTRIENTES	$C_{N2,ij}$	<i>Nitrógeno gaseoso.</i> Es el único producto de la desnitrificación.	gN/m ³
	$C_{NH4,ij}$	<i>Nitrógeno Amoniacal</i> (NH ₄ ⁺ -N & NH ₃ -N). Se supone que se encuentra en la forma de NH ₄ ⁺ . Se produce por degradación de la materia orgánica y se degrada por nitrificación y captación en el crecimiento de la biomasa.	gN/m ³
	$C_{NO3,ij}$	<i>Nitrato</i> (NO ₃ ⁻ -N & NO ₂ ⁻ -N). Se supone que incluye los nitratos y nitritos, ya que los nitritos no se incluyen como un componente separado del modelo. Para los cálculos estequiométricos, se considera solo los nitratos. Se produce por nitrificación y se consume por desnitrificación y respiración anóxica.	gN/m ³
	$C_{O2,ij}$	<i>Oxígeno disuelto.</i> Su concentración aumenta debido a la reaireación atmosférica y la fotosíntesis, y decrece por los procesos de respiración celular.	gO ₂ /m ³

Tipo	Variable	Descripción	Unidad
	$C_{SO4,ij}$	<i>Sulfato</i> . Las bacterias acetotróficas reductoras de sulfato utilizan azufre en forma de sulfato como receptor de electrones en la oxidación de los productos de fermentación.	gs/m ³
BIOMASA	$C_{alg,ij}$	<i>Algas</i> . Se considera que el crecimiento del fitoplancton incluye la captación de nitrógeno amoniacal y nitratos.	gDQO/m ³
	$C_{amb,ij}$	<i>Bacterias acetotróficas metanogénicas</i> . Su crecimiento anaeróbico consume acetato y produce metano (que no es considerado un componente del modelo).	gDQO/m ³
	$C_{asrb,ij}$	<i>Bacterias acetotróficas reductoras de sulfato</i> . Utiliza sulfato como receptor de electrones en la oxidación de los productos de fermentación.	gDQO/m ³
	$C_{ab,ij}$	<i>Bacterias autotróficas</i> . Los organismos nitrificantes llevan a cabo la nitrificación. Se considera que C_{NH4} se nitrifica directamente a C_{NO3} .	gDQO/m ³
	$C_{Ecoli,ij}$	<i>E. coli</i> . Se considera que los organismos patógenos se remueven con una cinética de primer orden.	MNP/m ³
	$C_{fb,ij}$	<i>Bacterias fermentadoras</i> . En condiciones anaeróbicas consumen DQO soluble fermentable rápidamente biodegradable y producen acetato.	gDQO/m ³
	$C_{hb,ij}$	<i>Bacterias heterotróficas</i> . Son responsables de la hidrólisis, la mineralización de la materia orgánica (crecimiento aeróbico) y la desnitrificación (crecimiento anóxico).	gDQO/m ³

i y j hacen referencia a la laguna y a la capa, respectivamente.

Las ecuaciones algebraicas del modelo describen las interconexiones entre lagunas, las funciones impulsoras y las velocidades de reacción de los distintos componentes. Los términos de generación y consumo se detallan en la Tabla 15. Por otro lado, las entradas del modelo fueron aproximadas con series de Fourier obteniendo funciones periódicas que corresponden a temperatura, radiación solar, precipitaciones, evaporación, caudales de entrada y concentraciones de entrada (Estrada, 2010).

La tasa de crecimiento de los organismos considerados es función de la temperatura (T), la disponibilidad de nutrientes (N) y el pH, incluyendo también la radiación solar (I) para la biomasa de los grupos fotosintéticos y la materia orgánica (DQO) para el resto de los

microorganismos. Esta dependencia se incluye a través de funciones de limitación en un modelo multiplicativo. Las funciones de limitación modifican la tasa máxima de crecimiento al tomar valores entre 0 y 1.

$$R_{X,ij,growth} = k_{X,ij,growth} f(T) f(N)_{X,ij} f(I)_{X=alg,ij} f(COD)_{X \neq ALG,ij} C_{X,ij} \quad (69)$$

$$R_{X,ij,decay} = k_{X,ij,decay} f(T) C_{X,ij} \quad (70)$$

$$X = C_{alg,i}, C_{amb,i}, C_{asrb,i}, C_{ab,i}, C_{Ecoli,i}, C_{fb,i}, C_{hb,i}; i = \text{laguna}; j = \text{capa}.$$

Las cinéticas de tipo Monod se utilizan para modelar la mayoría de las funciones de limitación para el crecimiento de biomasa relacionado con la concentración de nutrientes y con la concentración de los distintos tipos de carga orgánica.

La temperatura es una variable que influye en los fenómenos físicos y en las reacciones químicas y bioquímicas que ocurren en las lagunas de estabilización (Rodríguez Serrano, 2008). En general y para los intervalos de temperatura normales en las lagunas, se puede decir que la velocidad de degradación aumenta con la temperatura, en especial en lo que concierne a la actividad de las bacterias. Se supone que las tasas de respiración y de mortalidad natural de la biomasa aumentan exponencialmente con la temperatura según un comportamiento de tipo Arrhenius. Las bajas temperaturas ocasionan que estos fenómenos ocurran a menor velocidad.

Por otro lado, la luz es fundamental para la actividad fotosintética. Ésta depende no solo de la luz que alcanza la superficie del agua, sino de la que penetra en profundidad. Se utiliza la ecuación de Beer para modelar el efecto que ocasiona la profundidad de la columna de agua.

Los principales procesos que ocurren dentro de las lagunas se listan en la Tabla 11 clasificados por la condición de la laguna que más los favorece. Es decir, que los procesos aeróbicos ocurrirán dentro de las lagunas aeróbicas y en la capa superior de las lagunas

facultativas, mientras que los procesos anaeróbicos o anóxicos ocurrirán en la capa inferior de las lagunas facultativas y en las lagunas anaeróbicas. La descripción de los mismos se detalla en la Tabla 12, junto con sus expresiones.

La remoción del fosfato no se considera en el modelo, ya que su principal mecanismo de remoción es físico y químico (Sah, Rousseau, Hooijmans, & Lens, 2011).

Tabla 11. Procesos principales de las distintas lagunas

<i>Laguna aeróbica</i>	<i>Capa Superior de la Laguna Facultativa</i>	<i>Capa Inferior de la Laguna Facultativa</i>	<i>Laguna anaeróbica</i>
Crecimiento algal sobre C_{NH4} Crecimiento algal sobre C_{NO3} Crecimiento aeróbico de C_{hb} sobre C_{SA} Crecimiento aeróbico de C_{hb} sobre C_{SF}			
		Crecimiento anóxico de C_{hb} sobre C_{SA} Crecimiento anóxico de C_{hb} sobre C_{SF}	
Crecimiento aeróbico de C_{ab}			
		Crecimiento anaeróbico de C_{fb} Crecimiento anaeróbico de C_{asrb} Crecimiento anaeróbico de C_{amb}	
	Muerte de C_{alg} Muerte de C_{hb} Muerte de C_{ab} Muerte de C_{fb} Muerte de C_{asrb} Muerte de C_{amb} Muerte de C_{Ecoli}		
	Hidrólisis		
Re-aireación			
Re-aireación Mecánica			

Tabla 12. Descripción y expresiones de los procesos cinéticos.

PROCESOS ρ
Crecimiento algal sobre C_{NH4} : en este proceso se describe el crecimiento de las algas considerando la captación de nitrógeno en forma amoniacal. La velocidad del mismo depende de la temperatura y la radiación solar.
$R_{growth_{Alg/NH4,i,j}} = \mu_{alg} \cdot fT \cdot fL_{i,j} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHAlg} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{alg,i,j}$
Crecimiento algal sobre C_{NO3} : Similar al proceso anterior, pero considerando la captación de nitrógeno en forma de nitratos.
$R_{growth_{Alg/NO3,i,j}} = \mu_{alg} \cdot fT \cdot fL_{i,j} \cdot \frac{C_{NO3,i,j}}{K_{NOAlg} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{K_{NHAlg}}{K_{NHAlg} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{alg,i,j}$
Crecimiento aeróbico de C_{hb} sobre C_{SF} : la velocidad del crecimiento heterotrófico depende de la disponibilidad de sustrato y amonio, así como también de la concentración de receptores de electrones (oxígeno). El crecimiento aeróbico de las bacterias heterotróficas sobre el sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (mineralización de la materia orgánica) consume oxígeno, mientras que el nitrógeno amoniacal se incorpora a la biomasa.
$R_{growth_{HB/SF,i,j}} = \mu_{hb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SF,i,j}}{C_{SF,i,j} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{C_{SF,i,j}}{K_{SFh} + C_{SF,i,j}} \cdot \frac{C_{O2,i,j}}{K_{Oh} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHh} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{hb,i,j}$
Crecimiento aeróbico de C_{hb} sobre C_{SA} : este proceso es similar al anterior. Se consume oxígeno y acetato, y se incorpora nitrógeno amoniacal a la biomasa.
$R_{growth_{HB/SA,i,j}} = \mu_{hb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{C_{SA,i,j} + C_{SF,i,j}} \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{K_{SAh} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{C_{O2,i,j}}{K_{Oh} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHh} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{hb,i,j}$
Crecimiento anóxico de C_{hb} sobre C_{SF} : en el crecimiento anóxico de las bacterias heterotróficas, se consume nitrato (desnitrificación) y sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, junto con la incorporación de nitrógeno amoniacal a la biomasa.
$R_{growth_{HB/SF,i,j}} = \eta_{hb} \cdot \mu_{hb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SF,i,j}}{C_{SF,i,j} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{C_{SF,i,j}}{K_{SFh} + C_{SF,i,j}} \cdot \frac{K_{Oh}}{K_{Oh} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{C_{NO3,i,j}}{K_{NOh} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHh} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{hb,i,j}$

PROCESOS ρ

Crecimiento anóxico de C_{hb} sobre C_{SA} : en este proceso se consume nitrato y acetato, y se incorpora nitrógeno amoniacal a la biomasa.

$$R_{Agrowth_{HB/SA,i,j}} = \eta_{hb} \cdot \mu_{hb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{C_{SA,i,j} + C_{SF,i,j}} \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{K_{SAh} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{K_{Oh}}{K_{Oh} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{C_{NO3,i,j}}{K_{NOh} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHh} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{hb,i,j}$$

Crecimiento aeróbico de C_{ab} : el crecimiento aeróbico de las bacterias nitrificantes, denominado nitrificación, consume amonio y oxígeno, y produce nitrato. Además, una pequeña fracción del nitrógeno amoniacal se incorpora a la biomasa.

$$R_{growth_{AB,i,j}} = \mu_{ab} \cdot fT \cdot \frac{C_{O2,i,j}}{K_{Oab} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NH4} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{ab,i,j}$$

Crecimiento anaeróbico de C_{fb} : el crecimiento de las bacterias fermentadoras en condiciones anaeróbicas consume sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, y como resultado se produce acetato. Nuevamente, se incorpora nitrógeno amoniacal a la biomasa.

$$R_{growth_{FB,i,j}} = \mu_{fb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SF,i,j}}{K_{SFfb} + C_{SF,i,j}} \cdot \frac{K_{Ofb}}{K_{Ofb} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{K_{NOfb}}{K_{NOfb} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHfb} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{fb,i,j}$$

Crecimiento anaeróbico de C_{asrb} : en el crecimiento anaeróbico de las bacterias acetotróficas sulfato reductoras, se utiliza sulfato como receptor de electrones para la oxidación de acetato. En este proceso se incorpora nitrógeno amoniacal a la biomasa.

$$R_{growth_{ASRB,i,j}} = \mu_{asrb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{K_{SAasrb} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{C_{SO4,i,j}}{K_{SOasrb} + C_{SO4,i,j}} \cdot \frac{K_{Oasrb}}{K_{Oasrb} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{K_{NOasrb}}{K_{NOasrb} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHasrb} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{asrb,i,j}$$

Crecimiento anaeróbico de C_{amb} : en el crecimiento anaeróbico de las bacterias acetotróficas metanogénicas, se consume acetato y se incorpora amonio a la biomasa.

$$R_{growth_{AMB,i,j}} = \mu_{amb} \cdot fT \cdot \frac{C_{SA,i,j}}{K_{SAamb} + C_{SA,i,j}} \cdot \frac{K_{Oamb}}{K_{Oamb} + C_{O2,i,j}} \cdot \frac{K_{NOamb}}{K_{NOamb} + C_{NO3,i,j}} \cdot \frac{C_{NH4,i,j}}{K_{NHamb} + C_{NH4,i,j}} \cdot C_{amb,i,j}$$

Muerte de C_{alg} :

$$R_{death_{Alg,i,j}} = b_{alg} \cdot fT \cdot C_{alg,i,j}$$

PROCESOS ρ

Muerte de C_{hb} : en este proceso se libera materia orgánica, principalmente sustrato particulado lentamente biodegradable y pequeñas fracciones de materia orgánica particulada inerte y sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, además de amonio. Todos los procesos de muerte de biomasa son similares.

$$Rdeath_{HB,i,j} = b_{hb} \cdot fT \cdot C_{hb,i,j}$$

Muerte de C_{ab} $Rdeath_{AB,i,j} = b_{ab} \cdot fT \cdot C_{ab,i,j}$

Muerte de C_{fb} $Rdeath_{FB,i,j} = b_{fb} \cdot fT \cdot C_{fb,i,j}$

Muerte de C_{asrb} $Rdeath_{ASRB,i,j} = b_{asrb} \cdot fT \cdot C_{asrb,i,j}$

Muerte de C_{amb} $Rdeath_{AMB,i,j} = b_{amb} \cdot fT \cdot C_{amb,i,j}$

Hidrólisis: describe la conversión del sustrato particulado lentamente biodegradable principalmente en sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, y en menor medida en materia orgánica soluble inerte. Se libera amonio durante este proceso. Se lleva a cabo por las bacterias heterotróficas y fermentadoras, siendo menor la acción de estas últimas (corregidas por el factor η_{hy}).

$$Rhydro_{i,j} = K_{hy} \left[\frac{C_{XS,i,j}/(C_{hb,i,j}+C_{fb,i,j})}{K_x+C_{XS,i,j}/(C_{hb,i,j}+C_{fb,i,j})} \right] \cdot (C_{hb,i,j} + \eta_{hy} \cdot C_{fb,i,j})$$

Muerte de C_{Ecoli} : $Rdeath_{Ecoli,i,j} = b_{Ecoli} \cdot fT \cdot C_{Ecoli,i,j}$

Re-aireación:

$$Raer_{i,j} = K_a \cdot (C_s - C_{O2,i,j})/d_1$$

Irradiancia:

$$fL_{i,j} = \frac{L_{i,j}}{L_o} \cdot e^{1-\frac{L_{i,j}}{L_o}} \quad L_{i,j} = I_r \frac{1-e^{-K_{ext,i,j} \cdot h_{total,i,j}}}{K_{ext,i,j} \cdot h_{total,i,j}}$$

$$K_{ext,i,j} = \left(K_1 + K_2 \cdot \frac{C_{alg,i,j}+C_{hb,i,j}+C_{ab,i,j}+C_{fb,i,j}+C_{asrb,i,j}+C_{amb,i,j}}{ccl} \right) \cdot 1000$$

Temperatura:

$$fT = \vartheta^{(T-20)}$$

(Langergraber, Rousseau, García, & Mena, 2009), (Sah, Rousseau, Hooijmans, & Lens, 2011).

Tabla 13. Parámetros del modelo del sistema de lagunas de estabilización.

<i>Parámetro</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>	
μ_{alg}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{alg}	2	d^{-1}	
K_{NHalg}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{alg}	0.01	gN/m^3	
K_{NOalg}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NO3} para C_{alg}	0.01	gN/m^3	
b_{alg}	Velocidad de muerte de C_{alg}	0.100	d^{-1}	*
μ_{hb}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{hb}	6	d^{-1}	
K_{SAh}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{SA} para C_{hb}	4	$gDQO/m^3$	
K_{SFh}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{SF} para C_{hb}	3	$gDQO/m^3$	
K_{Oh}	Coeficiente de saturación/ inhibición de CO_2 para C_{hb}	0.200	gO_2/m^3	*
K_{NHh}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{hb}	0.050	gN/m^3	*
K_{NOh}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NO3} para C_{hb}	0.5	gN/m^3	
η_{hb}	Factor de corrección para el crecimiento anóxico de C_{hb}	0.8	-	
b_{hb}	Velocidad de muerte de C_{hb}	0.400	d^{-1}	*
μ_{ab}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{ab}	2.000	d^{-1}	*
K_{NHa}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{ab}	0.200	gN/m^3	*
K_{Oab}	Coeficiente de saturación/ inhibición de CO_2 para C_{ab}	0.500	gO_2/m^3	*
b_{ab}	Velocidad de muerte de C_{ab}	0.015	d^{-1}	*
μ_{fb}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{fb}	6	d^{-1}	
K_{SFfb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{sf} para C_{fb}	28	$gDQO/m^3$	
K_{Ofb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de CO_2 para C_{fb}	0.2	gO_2/m^3	
K_{NOfb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NO3} para C_{fb}	0.5	gN/m^3	
K_{NHfb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{fb}	0.01	gN/m^3	
b_{fb}	Velocidad de muerte de C_{fb}	0.020	d^{-1}	*
μ_{asrb}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{asrb}	0.18	d^{-1}	
K_{SAasrb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{SA} para C_{asrb}	24	$gDQO/m^3$	
K_{SOasrb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{SO4} para C_{asrb}	19	gs/m^3	
K_{Oasrb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de CO_2 para C_{asrb}	0.0002	gO_2/m^3	
K_{NOasrb}	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NO3} para C_{asrb}	0.0005	gN/m^3	

<i>Parámetro</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>	
$K_{NH\text{asrb}}$	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{asrb}	0.01	gN/m^3	
b_{asrb}	Velocidad de muerte de C_{asrb}	0.012	d^{-1}	*
μ_{amb}	Velocidad máxima de crecimiento de C_{amb}	0.085	d^{-1}	
$K_{SA\text{amb}}$	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{SA} para C_{amb}	56	gDQO/m^3	
$K_{O\text{amb}}$	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{O2} para C_{amb}	0.0002	gO_2/m^3	
$K_{NO\text{amb}}$	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NO3} para C_{amb}	0.0005	gN/m^3	
$K_{NH\text{amb}}$	Coeficiente de saturación/ inhibición de C_{NH4} para C_{amb}	0.01	gN/m^3	
b_{amb}	Velocidad de muerte de C_{amb}	0.008	d^{-1}	*
K_x	Coeficiente de saturación/ inhibición en la hidrólisis	0.1	gDQOsf/gDQObm	
K_{hy}	Velocidad de hidrólisis	3	d^{-1}	
η_{hy}	Factor de corrección para la hidrólisis	0.1	-	
$b_{E\text{coli}}$	Velocidad de muerte de $C_{E\text{coli}}$	0.25	d^{-1}	
Y_{hb}	Coeficiente de rendimiento para C_{hb}	0.630	gDQObm/gDQOsf	*
Y_{ab}	Coeficiente de rendimiento para C_{ab}	0.24	gDQObm/gN	
Y_{amb}	Coeficiente de rendimiento para C_{amb}	0.032	gDQObm/gDQOsa	
Y_{fb}	Coeficiente de rendimiento para C_{fb}	0.053	gDQObm/gDQOsf	
Y_{asrb}	Coeficiente de rendimiento para C_{asrb}	0.05	gDQObm/gDQOsa	
f_{si}	Fracción de C_{SI} formado durante la hidrólisis	0	gDQOsi/gDQOxs	
i_{nbm}	Fracción de nitrógeno en las bacterias	0.070	gN/gDQObm	*
i_{nxalg}	Fracción de nitrógeno en las algas	0.063	gN/gDQOalg	*
i_{nxs}	Fracción de nitrógeno en C_{xs}	0.040	gN/gDQO	*
i_{nxi}	Fracción de nitrógeno en C_{XI}	0.030	gN/gDQOxi	*
i_{nsi}	Fracción de nitrógeno en C_{SI}	0.01	gN/gDQOsi	
i_{nsf}	Fracción de nitrógeno en C_{SF}	0.030	gN/gDQO	*
f_p	Fracción de C_{XI} formado durante los procesos de muerte	0.1	gDQOxi/gDQObm gDQOxi/gDQOalg	
θ	Coeficiente en la función de limitación por temperatura	1.070	-	*
K_a	Velocidad de re-aireación	0.230	d^{-1}	*
C_s	Concentración de saturación del oxígeno	7.75	gO_2/m^3	
K_l	Coeficiente de atenuación de la luz por las algas	0.02	$\text{m}^2/\text{gDQOalg}$	
K_2	Atenuación de luz en el fondo	2.137	m^{-1}	

<i>Parámetro</i>	<i>Descripción</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>	
L_o	Intensidad de luz óptima	150	ly/d	
k_m	Coeficiente de transferencia de masa entre capas	0.022	m ² /d	*

(Sah, Rousseau, Hooijmans, & Lens, 2011)

(*) parámetros inciertos para el análisis de sensibilidad global realizado en el 5.

Los parámetros relacionados con las dimensiones de las lagunas se encuentran en la Tabla 14.

Tabla 14. Parámetros dimensionales de las Lagunas.

	Laguna 1	Laguna 2	Laguna3
Volumen (m ³)	15 000	15 000	55 000
Área (m ²)	6250	6250	18 750
Tiempo de residencia medio (días)	3	3	11

Tabla 15. Términos de generación y consumo en el balance de masa.

Variable	Generación y consumo
C_{alg}	$F_{Alg,i,j} = Rgrowth_{Alg/NH_4,i,j} + Rgrowth_{Alg/NO_3,i,j} - Rdeath_{Alg,i,j}$
C_{hb}	$F_{HB,i,j} = Rgrowth_{HB/SA,i,j} + Rgrowth_{HB/SF,i,j} + RAgrowth_{HB/SA,i,j} + RAgrowth_{HB/SF,i,j} - Rdeath_{HB,i,j}$
C_{ab}	$F_{AB,i,j} = Rgrowth_{AB,i,j} - Rdeath_{AB,i,j}$
C_{fb}	$F_{FB,i,j} = Rgrowth_{FB,i,j} - Rdeath_{FB,i,j}$
C_{asrb}	$F_{ASRB,i,j} = Rgrowth_{ASRB,i,j} - Rdeath_{ASRB,i,j}$
C_{amb}	$F_{AMB,i,j} = Rgrowth_{AMB,i,j} - Rdeath_{AMB,i,j}$
C_{Ecoli}	$F_{Ecoli,i,j} = -Rdeath_{Ecoli,i,j}$
C_{Xs}	$F_{XS,i,j} = (1 - f_{p1}) \cdot Rdeath_{Alg,i,j} + (1 - f_{p2}) \cdot Rdeath_{HB,i,j} + (1 - f_{p3}) \cdot Rdeath_{AB,i,j} + (1 - f_{p4}) \cdot Rdeath_{FB,i,j} + (1 - f_{p5}) \cdot Rdeath_{ASRB,i,j} + (1 - f_{p6}) \cdot Rdeath_{AMB,i,j} - Rhydro_{i,j}$
C_{XI}	$F_{XI,i,j} = f_{p1} \cdot Rdeath_{Alg,i,j} + f_{p2} \cdot Rdeath_{HB,i,j} + f_{p3} \cdot Rdeath_{AB,i,j} + f_{p4} \cdot Rdeath_{FB,i,j} + f_{p5} \cdot Rdeath_{ASRB,i,j} + f_{p6} \cdot Rdeath_{AMB,i,j}$
C_{SA}	$F_{SA,i,j} = -\frac{1}{Y_{hb}} (Rgrowth_{HB/SA,i,j} + RAgrowth_{HB/SA,i,j}) + \frac{(1-Y_{fb})}{Y_{fb}} \cdot Rgrowth_{FB,i,j} - \frac{1}{Y_{asrb}} Rgrowth_{ASRB,i,j} - \frac{1}{Y_{amb}} Rgrowth_{AMB,i,j}$
C_{SI}	$F_{SI,i,j} = f_{SI} \cdot Rhydro_{i,j}$
C_{SF}	$F_{SF,i,j} = -\frac{1}{Y_{hb}} (Rgrowth_{HB/SF,i,j} + RAgrowth_{HB/SF,i,j}) - \frac{1}{Y_{fb}} \cdot Rgrowth_{FB,i,j} + (1-f_{SI}) \cdot Rhydro_{i,j}$

Variable	Generación y consumo
C_{O2}	$F_{O2,i,j} = R_{growth_{Alg/NH4,i,j}} + (1 + 4.57 \cdot i_{NXAlg}) \cdot R_{growth_{Alg/NO3,i,j}} + (1 - 1/Y_{hb}) \cdot (R_{growth_{HB/SA,i,j}} + R_{growth_{HB/SF,i,j}}) + \left(1 - \frac{4.75}{Y_{ab}}\right) \cdot R_{growth_{AB,i,j}} + Raer_{i,j}$
C_{NH4}	$F_{NH4,i,j} = -i_{NAlg} \cdot R_{growth_{Alg/NH4,i,j}} - i_{NBM} \cdot (R_{growth_{HB/SA,i,j}} + RA_{growth_{HB/SA,i,j}} + R_{growth_{ASRB,i,j}} + R_{growth_{AMB,i,j}}) - (i_{NBM} - i_{NSF}/Y_{hb}) \cdot (R_{growth_{HB/SF,i,j}} + RA_{growth_{HB/SF,i,j}} - (i_{NBM} - i_{NSF}/Y_{fb}) \cdot R_{growth_{FB,i,j}} - (i_{NBM} - i_{NSF}/Y_{ab}) \cdot R_{growth_{AB,i,j}} + [(f_{p1} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NXAlg} - (f_{p1} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{Alg,i,j}} + [(f_{p2} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{HB,i,j}} + [(f_{p3} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p3} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{AB,i,j}} + [(f_{p4} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p4} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{FB,i,j}} + [(f_{p5} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p5} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{ASRB,i,j}} + [(f_{p6} - 1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p6} \cdot i_{NXI})] \cdot R_{death_{AMB,i,j}} + [i_{NXS} - f_{SI} \cdot i_{NSI} - (1 - f_{SI}) \cdot i_{NSF}] \cdot R_{hydro_{i,j}}$
C_{NO3}	$F_{NO3,i,j} = -i_{NXAlg} \cdot R_{growth_{Alg/NO3,i,j}} - ((1 - Y_{hb})/2.86 \cdot Y_{hb}) \cdot (RA_{growth_{HB/SA,i,j}} + RA_{growth_{HB/SF,i,j}}) + 1/Y_{ab} \cdot R_{growth_{AB,i,j}}$
C_{SO4}	$F_{SO4,i,j} = -\frac{1-Y_{asrb}}{2 \cdot Y_{asrb}} \cdot R_{growth_{ASRB,i,j}}$
C_{N2}	$F_{N2,i,j} = ((1 - Y_{hb})/2.86 \cdot Y_{hb}) \cdot (RA_{growth_{HB/SA,i,j}} + RA_{growth_{HB/SF,i,j}})$

4.3 Resultados Numéricos

El modelo se formula en gPROMS y se resuelve con DASOLV (PSEnterprise Ltd., 2014).

El objetivo principal es comparar el desempeño de dos configuraciones distintas de sistemas de lagunas de iguales dimensiones, utilizando para ello el valor de la concentración de salida de materia orgánica de la planta de tratamientos de efluentes. El tiempo inicial corresponde al mes de septiembre.

Globalmente, se puede observar en la Figura 31 que no hay grandes diferencias entre la concentración de salida de la configuración convencional (3B) con la configuración actual de la planta (3A), siendo la primera levemente menor. Se analizaron los distintos tipos de materia orgánica por separado.

En el caso de la concentración de la materia orgánica inerte tanto particulada como soluble, prácticamente es la misma para ambas configuraciones, esto se debe a su baja reactividad. Los procesos de lisis celular liberan una fracción muy baja de CXI. Por lo tanto, las concentraciones de ambos compuestos dependen principalmente de la concentración en la corriente de entrada (Figuras 32 y 33).

En la Figura 34 se muestran las concentraciones de los productos de fermentación. Para la configuración convencional, se puede observar que alcanza los valores más elevados, debido a la producción de las bacterias fermentadoras. Estas diferencias se compensan con los bajos valores del sustrato particulado lentamente biodegradable y del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación.

Por otro lado, en la configuración actual de la planta (*aer-aer-fac*), las mayores contribuciones al DQO de salida se dan por la concentración de sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación.

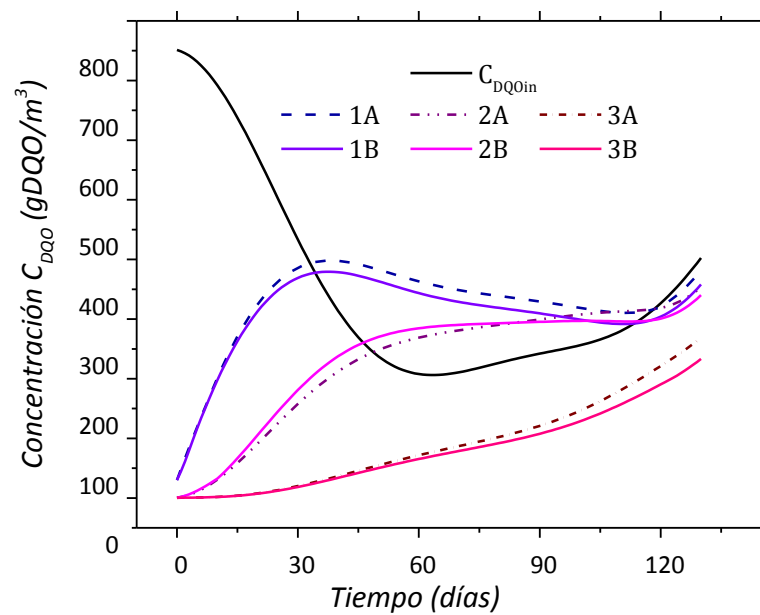


Figura 31. Concentración total de DQO.

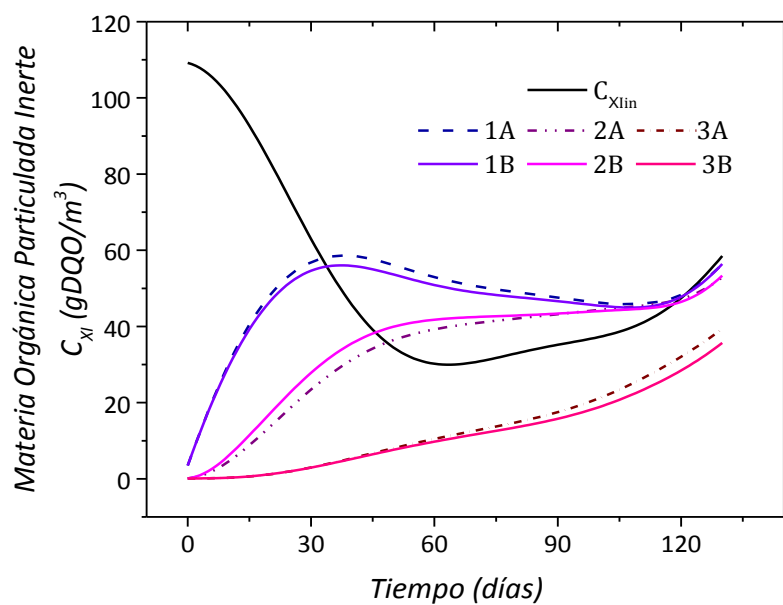


Figura 32. Concentración de materia orgánica particulada inerte (C_{Xi}).

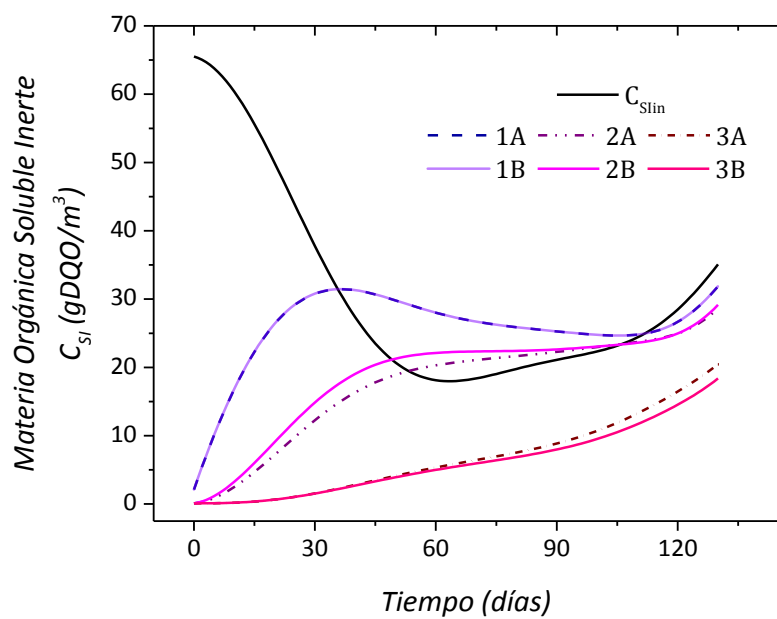


Figura 33. Concentración de materia orgánica soluble inerte (C_{SI}).

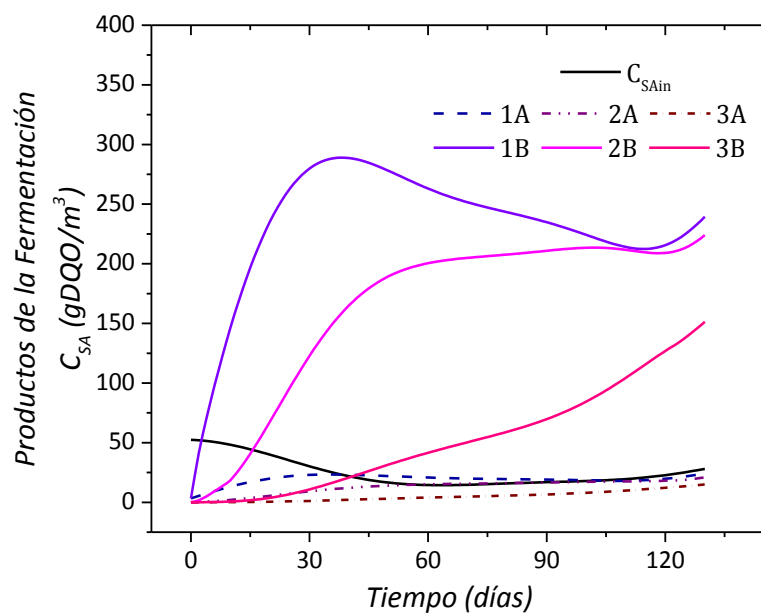


Figura 34. Concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}).

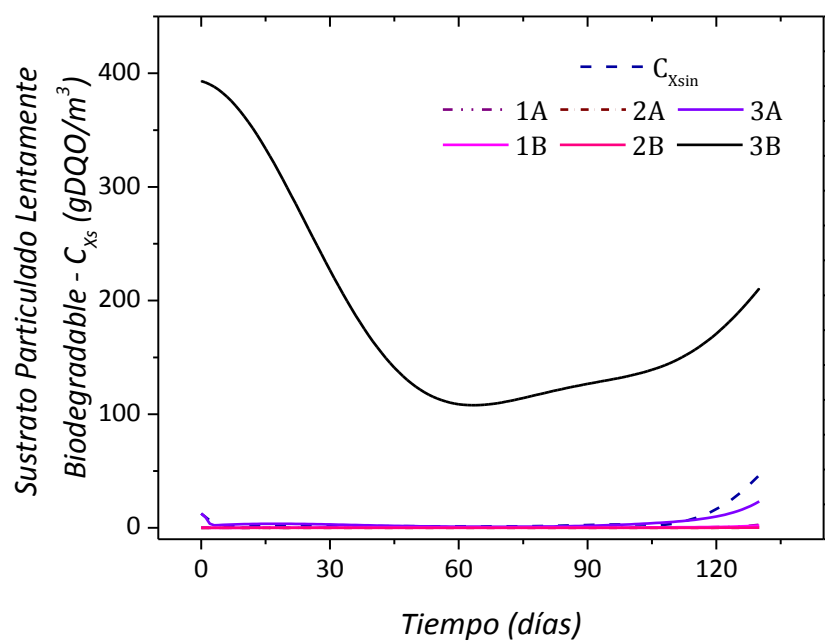


Figura 35. Concentración de sustrato particulado lentamente biodegradable (C_{xs}).

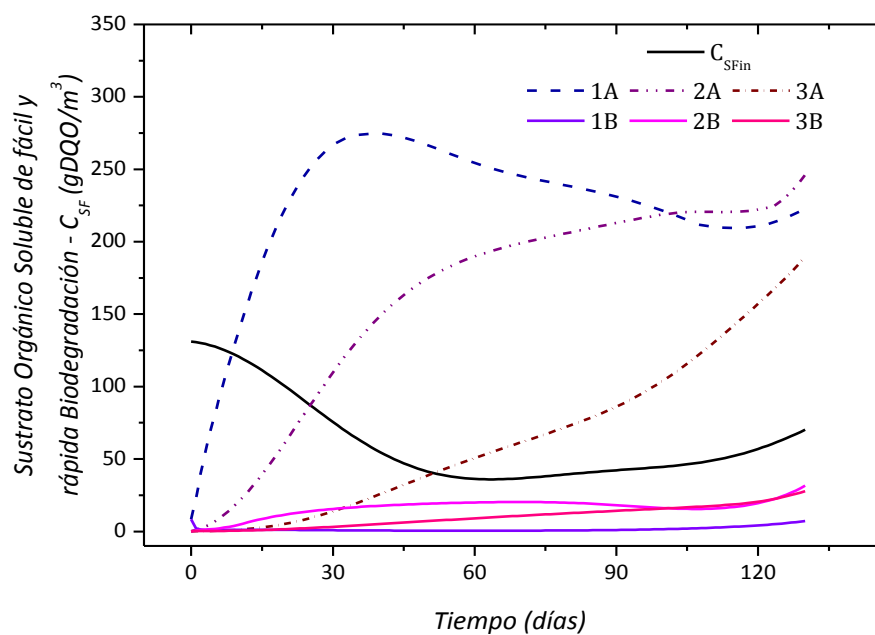


Figura 36. Concentración de sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}).

4.4 Conclusiones

Se presentó y adaptó un modelo matemático mecanístico detallado para distintos tipos de configuraciones de sistemas de lagunas de estabilización a fin de comparar su capacidad de oxidar la materia orgánica.

La configuración convencional (*anaer-fac-aer*) resulta levemente mejor que la configuración actual de la planta de tratamiento de efluentes (*aer-aer-fac*) para todo el horizonte de tiempo considerado. A pesar que las diferencias no sean tan significativas como se esperaba por el hecho de tratarse de la configuración convencional aceptada, este hecho puede afectar la energía total consumida por el sistema de aireadores de las lagunas aeróbicas.

Los resultados proporcionan información útil sobre las complejas relaciones entre los microorganismos, nutrientes y concentración de materia orgánica, así como información sobre el impacto de la modificación en el sistema de lagunas que se puede utilizar para mejorar el control de la composición del efluente.

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD GLOBAL EN MODELOS DINÁMICOS DE SISTEMAS DE LAGUNAS DE ESTABILIZACIÓN

5.1 Introducción

Los modelos mecanísticos de lagunas de tratamiento de aguas residuales presentan un gran número de parámetros, involucrados en funciones de alta no linealidad. La incertidumbre asociada a dichos parámetros resulta de errores de medición o de la imposibilidad de modelar adecuadamente el comportamiento del sistema. Los valores de las variables de estado pueden ser muy influenciadas por este tipo de incertidumbre. Por esta razón, es importante identificar los parámetros a los que las variables de estado son más sensibles, mediante análisis de sensibilidad. En los últimos años, se han presentado algunas contribuciones para el caso de sistemas de tratamiento de aguas residuales. Sin, Gernaey, Neumann, van Loodsrecht y Gujer (2011) aplicaron el método de Coeficientes de Regresión Estandarizados (*Standardized Regression Coefficient*, SRC), desarrollando regresiones lineales en las salidas de simulaciones Monte Carlo, sobre el layout de modelo de referencia nº 1 (*Benchmark Simulation Model no. 1 plant layout*) (Copp, 2000) de una planta de barros activados considerando tres escenarios distintos de fuentes de incertidumbre, con 26, 7 y 33 parámetros inciertos, respectivamente. Los autores presentaron resultados que implican la descomposición de la varianza de las variables que describen el desempeño de la planta, tales como la producción de barros, la demanda

energética y la concentración de nutrientes en el efluente. El SRC es un método simple e intuitivo, pero requiere que el sistema sea lineal o al menos linealizabile.

En Cosenza, Mannina, Vanrolleghem y Neumann (2013) se realiza una comparación entre distintos métodos de sensibilidad global para evaluar los procesos más relevantes que se producen en los sistemas de tratamiento de aguas residuales. Los autores aplicaron el SRC, el método de Morris y el método FAST extendido a un modelo no lineal de un biorreactor integrado con una membrana, considerando 21 variables de salidas y 79 parámetros del modelo. La comparación de los resultados obtenidos con los tres métodos permitió determinar inconsistencias obtenidas con el método de Morris, mientras que los otros dos métodos proporcionaron resultados consistentes, a pesar de que el método de SRC se utilizó fuera de su rango de aplicación.

Por otro lado, Chen, Tian, Cao, Zhang y Zhang (2012) aplicaron el método de FAST extendido al modelo ASM3 (Henze, 2000) con la incorporación del concepto de productos microbianos solubles (*Soluble Microbial Products*, SMP) y los fenómenos de crecimiento simultáneo y almacenamiento en los biorreactores de membrana, considerando 29 parámetros inciertos del modelo. El estudio cuantifica la incertidumbre involucrada en las predicciones del proceso biológico a tres tiempos de retención (10, 30 y 50 días) en la producción de barros, la remoción de materia orgánica, la producción de SMP y la eficiencia de nitrificación.

En relación a los sistemas ecológicos, Estrada y Diaz (2010) llevaron a cabo análisis de sensibilidad global en un modelo dinámico de calidad de agua, con 30 ecuaciones diferenciales y 60 algebraicas, considerando más de 20 parámetros como inciertos. Garambois, Roux, Larnier, Castaings y Dartus (2013), y Massmann y Holzmann (2012) también contribuyeron al estudio del comportamiento temporal de los índices de

sensibilidad en modelos hidrológicos complejos. Sin embargo, existe un número limitado de aplicaciones de análisis de sensibilidad global. Una revisión extensa, análisis y categorización de los métodos de GSA y sus aplicaciones en el campo del modelado hidrológico ha sido presentada por Song *et al.* (2015) y Mannina *et al.* (2014).

En este capítulo, se lleva a cabo análisis de sensibilidad global en modelos cinéticos dinámicos de sistemas de lagunas de estabilización. Dichos modelos constan de dos lagunas aeróbicas en serie seguidas por una facultativa, y se describieron en el Capítulo 4. El objetivo es determinar los parámetros más influyentes del modelo y realizar un ranking de los mismos. Se implementa un método basado en la descomposición de la varianza que permite realizar una priorización de factores o fijar los valores de los mismos considerando todo el rango de variación de los parámetros. Se obtuvieron los perfiles temporales de los índices de sensibilidad de primer orden, totales y de interacción para las 72 variables de estado considerando 20 parámetros como inciertos. Los resultados numéricos muestran que el costo computacional se justifica debido a la alta no linealidad del modelo y, porque no solo se capturan los efectos de primer orden asociados a cada parámetro, sino también los asociados a la interacción con otros parámetros del modelo. Debido a la mayor complejidad del modelo matemático respecto del presentado en el Capítulo 3, en este capítulo se introduce el estudio de otros estimadores de los índices de primer orden y totales, así como una nueva implementación de la metodología, que combina el uso de Excel, gPROMS y Fortran 90.

5.2 Estimadores de los índices de sensibilidad global

El cálculo de los índices de sensibilidad global se basa en las varianzas incondicionales y condicionales de cada variable de estado, y esto involucra el cálculo de integrales múltiples. Dichas varianzas se pueden calcular realizando simulaciones Monte Carlo del

modelo. En los últimos años y basado en el método de Sobol' (1993), se ha propuesto el cálculo de estimadores de los índices de sensibilidad global con fórmulas que presentan leves diferencias para la determinación de las varianzas condicionales e incluso, para la varianza incondicional, a partir de simulaciones Monte Carlo del modelo bajo estudio. La Tabla 16 muestra una comparación de los distintos estimadores de los índices (Saltelli *et al.*, 2010).

Tabla 16. Fórmulas para el cálculo de S_i y S_i^{TOT} para la variable de salida y en cada instante de tiempo t .

<i>Índice de primer orden</i>	<i>Ref</i>	<i>Índice de orden total</i>	<i>Ref</i>
$S_i = \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j \cdot y_{C_i}^j - \langle y_A \rangle^2}{V(Y)}$	1	$S_i^{tot} = \frac{V(Y) - \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j \cdot y_{D_i}^j + \langle y_A \rangle^2}{V(Y)}$	2
$S_i = \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_B^j \cdot (y_{D_i}^j - y_A^j)}{V(Y)}$	3	$S_i^{tot} = \frac{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N y_A^j \cdot (y_A^j - y_{D_i}^j)}{V(Y)}$	4
$S_i = \frac{V(Y) - \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N (y_B^j - y_{D_i}^j)^2}{V(Y)}$	5	$S_i^{tot} = \frac{\frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N (y_A^j - y_{D_i}^j)^2}{V(Y)}$	5

Referencia 1: (Sobol', 1993), 2: (Homma & Saltelli, 1996), 3: (Saltelli *et al.*, 2010), 4: (Sobol' & Shukhman, 2007), 5: (Jansen, 1999).

Asimismo, en este capítulo se utiliza la varianza de Allan como estimador de la varianza incondicional, como se propone en Sobol' y Shukhman (2007).

$$V(Y) = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^N (y_{A_j} - y_{B_j})^2 \quad (71)$$

Donde A , B , C_i and D_i , son matrices de dimensión $(N \times k)$, N es el tamaño de la muestra utilizada para las simulaciones Monte Carlo y k es el número de parámetros inciertos del modelo.

$$A = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix} \quad (72)$$

$$B = \begin{bmatrix} x'_{11} & x'_{12} & \dots & x'_{1k} \\ x'_{21} & x'_{22} & \dots & x'_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x'_{N1} & x'_{N2} & \dots & x'_{Nk} \end{bmatrix} \quad (73)$$

$$C_i = \begin{bmatrix} x'_{11} & x'_{12} & \dots & x_{1i} & \dots & x'_{1k} \\ x'_{21} & x'_{22} & \dots & x_{2i} & \dots & x'_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x'_{N1} & x'_{N2} & \dots & x_{Ni} & \dots & x'_{Nk} \end{bmatrix} \quad (74)$$

$$D_i = \begin{bmatrix} x_{11} & x_{12} & \dots & x'_{1i} & \dots & x_{1k} \\ x_{21} & x_{22} & \dots & x'_{2i} & \dots & x_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{N1} & x_{N2} & \dots & x'_{Ni} & \dots & x_{Nk} \end{bmatrix} \quad (75)$$

Cada columna de las matrices A y B se obtiene a partir de un muestreo de la función de distribución de los parámetros inciertos. Cada fila es una entrada aleatoriamente muestreada del modelo con la cual se evalúa la salida y del modelo. A se considera la matriz de “muestreo” (en ella se tiene una columna para cada parámetro incierto, y N filas que representan el número de escenarios considerado) mientras que B es la matriz de “re-muestreo”, donde se generan N nuevos escenarios aleatorios diferentes de los considerados para la matriz A , para los k parámetros inciertos. C_i es la matriz donde todos los parámetros excepto x_i son re-muestreados a partir de una combinación de las matrices A y B , donde se mantienen todas las columnas de la matriz B excepto la correspondiente al parámetro i y D_i es la matriz donde solo x_i es re-muestreado, es decir, se reemplaza en la matriz A la i -ésima columna. y_A y y_B son vectores de los N valores de salida del modelo obtenidos cuando las variables se evalúan con los parámetros de las matrices A y B , respectivamente. y_{C_i} y y_{D_i} son matrices de $k \times N$ evaluaciones del modelo con C_i y D_i , respectivamente. Por lo tanto, el número total de evaluaciones del modelo es $N \times (2k+2)$. La dimensionalidad del problema de análisis de sensibilidad se define por el número k de parámetros inciertos del modelo y el número de escenarios N , que determinan el número de evaluaciones del modelo. Se considera que las simulaciones Monte Carlo aproximan

adecuadamente el cálculo de las integrales múltiples cuando al incrementar N los perfiles promedio de las variables estimadas ya no varían.

5.3 Análisis de Sensibilidad en un Sistema de Lagunas de Estabilización

El modelo del sistema de lagunas de estabilización estudiado comprende 61 parámetros y 72 ecuaciones diferenciales, resultando en un problema de gran dimensionalidad. Para reducir el tamaño del problema, se implementa un procedimiento en dos etapas que incluye un análisis local seguido de un análisis de sensibilidad global sobre los parámetros identificados como relevantes en el primer paso, como se propone en Estrada y Diaz (2010) y Mannina *et al.* (2014).

Los índices de sensibilidad local se calculan como la derivada parcial de las salidas del modelo con respecto a los parámetros inciertos, variando cada parámetro individualmente y aplicando el método de diferencias finitas en el valor nominal del parámetro (obtenido de bibliografía). Luego, los parámetros se ordenan en forma decreciente por el valor de los índices de sensibilidad locales calculados y la frecuencia de su relevancia sobre todas las variables diferenciales de salida.

A continuación, se lleva a cabo un análisis de sensibilidad global sobre los parámetros seleccionados en la primera etapa. Sin embargo, el problema sigue siendo de gran tamaño y no puede resolverse totalmente en el entorno gPROMS como se realizó con modelos de menor tamaño (Ochoa, Estrada, Di Maggio, & Hoch, 2016). En primer lugar, no es posible correr todos los escenarios requeridos en forma simultánea en gPROMS debido a limitaciones de memoria. Por esta razón, se genera una muestra aleatoria en Excel que permita representar adecuadamente a toda la población, que como ya se ha mencionado, consiste de todas las posibles realizaciones en el rango de variación previsto para un gran

número de parámetros inciertos. Dicha muestra luego se fracciona en subconjuntos de escenarios de un tamaño que pueda ser utilizado en gPROMS sin exceder la capacidad de memoria. Se emplea Excel debido a que el generador de números aleatorios de gPROMS siempre genera el mismo conjunto de números aleatorios para permitir la reproducibilidad de los resultados (PSEnterprise Ltd., 2014). Versiones anteriores del software permitían generar sets de números aleatorios irreproducibles (Näf, 1994).

Las simulaciones Monte Carlo se llevan a cabo en gPROMS y los resultados se exportan a Fortran 90 para calcular las varianzas y los índices de sensibilidad en cada instante de tiempo. El cálculo de los índices se efectúa en otro entorno debido a que, por limitaciones de memoria, no se puede incluir directamente en gPROMS.

5.4 Resultados Numéricos

En este capítulo, se presenta el análisis dinámico de sensibilidad global para el modelo de un sistema de lagunas de estabilización utilizadas para el tratamiento secundario de aguas residuales presentado en los capítulos anteriores.

Como se explicó en la Sección 5.3, se realiza un análisis de sensibilidad local para reducir el tamaño del problema. En la Figura 37, se muestra un gráfico de frecuencia para aquellos parámetros que generan un valor de índice local superior a 1. Todos los parámetros del modelo se detallan en la Tabla 13, mientras que en la Tabla 17 se identifica un subconjunto de 20 parámetros localmente influyentes.

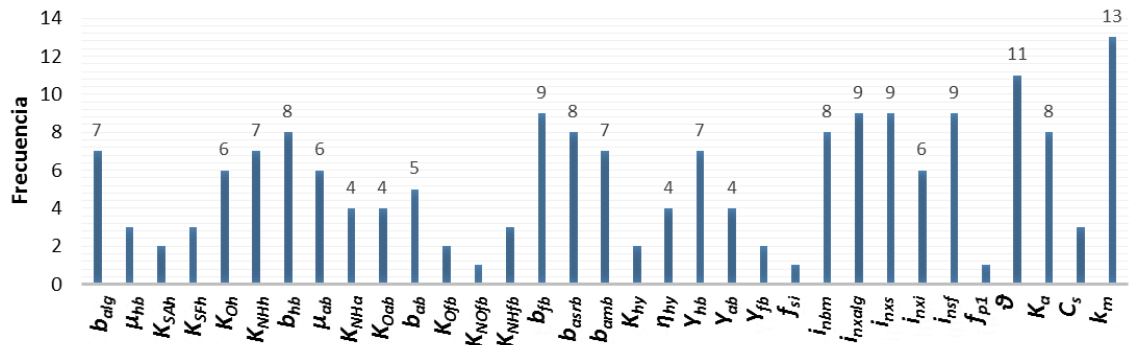


Figura 37. Resultados del análisis de sensibilidad local: La frecuencia de la influencia de los parámetros sobre todas las variables diferenciales. Los parámetros cuya frecuencia es nula no se representan.

Para llevar a cabo el análisis de sensibilidad global considerando estos 20 parámetros inciertos, se asociaron distribuciones de probabilidad normal a cada uno de ellos. Este tipo de distribución es frecuentemente utilizado para representar la probabilidad de ocurrencia de los parámetros de modelos ecológicos y biológicos en la literatura ((Estrada & Diaz, 2010), (Baklouti, Faure, Pawlowski, & Sciandra, 2006), (Pastres & Ciavatta, 2005), (Manache & Melching, 2008)). Para generar las matrices de muestreo, se consideran $N=1000$ escenarios. El horizonte de tiempo se fija en 12 días de operación. Se realizan 20 corridas de simulaciones estocásticas de $100 \times k$ parámetros inciertos cada una, en gPROMS (10 corridas para calcular S_i y 10 para calcular S_i^{TOT} a fin de lograr 1000 escenarios para las simulaciones Monte Carlo, para cada índice). Las muestras aleatorias de cada una de las 20 corridas provienen de una gran muestra aleatoria generada en Excel, que es fragmentada en 20 subconjuntos. El número total de puntos muestreados es de 40000. Las matrices de muestreo aleatorio se generaron en Excel y luego se importaron a gPROMS para realizar las simulaciones, como se mencionó en la Sección anterior. Los resultados de las simulaciones Monte Carlo se exportaron a Fortran 90 para calcular las varianzas y los índices de sensibilidad en cada instante de tiempo, con un paso de 0.25 para todos los estimadores listados en la Tabla 16.

Se calcularon los perfiles de los índices de sensibilidad para las 72 variables de estado diferenciales correspondientes a las concentraciones de los distintos componentes (Tabla 10) en cada laguna del sistema de tratamiento biológico (aeróbica-aeróbica-facultativa) y cada capa de la laguna facultativa.

Los resultados numéricos muestran que solo dos parámetros pueden explicar la mayor parte de la varianza de las variables de estado diferenciales: el coeficiente en la función de limitación por temperatura (θ) y el coeficiente de transferencia de masa entre capas en varias variables de la laguna facultativa (k_m), cuya influencia se resume en los gráficos radiales de la Figura 38. Los resultados que se presentan a continuación fueron aquellos obtenidos con los estimadores propuestos por Jansen (1999) para el índice de sensibilidad de primer orden y total. Estos estimadores presentan una mejor performance frente al resto de los estimadores ((Sobol', 1993), (Homma & Saltelli, 1996), (Saltelli *et al.*, 2010), y (Sobol' & Shukhman, 2007)), ya que se pudo verificar que, en todos los casos, la suma de los índices de primer orden es menor o igual a uno en todo instante de tiempo y, a la vez, se obtienen siempre valores positivos para los distintos índices.

Finalmente, se realiza análisis de sensibilidad global incluyendo cinco parámetros aleatorios adicionales, que habían sido considerados no influyentes en el análisis local (25 parámetros inciertos en total). Se calculan las varianzas incondicionales de todas las variables de estado y se comparan los valores con aquellos obtenidos previamente. Casi el 90% de los valores obtenidos del segundo análisis varían menos del 15%. Esta leve variación corrobora la clasificación previa.

Tabla 17. Parámetros inciertos del modelo

<i>Parámetro</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>	<i>Parámetro</i>	<i>Valor Nominal</i>	<i>Unidad</i>
θ	1.070	-	i_{nxalg}	0.063	gN/gDQOalg
k_m	0.022	m ² /d	b_{hb}	0.400	d ⁻¹
i_{nxs}	0.040	gN/gDQO	i_{nbm}	0.070	gN/gDQObm
i_{nsf}	0.030	gN/gDQO	K_a	0.230	d ⁻¹
K_{NHh}	0.050	gN/m ³	b_{alg}	0.100	d ⁻¹
K_{NHa}	0.200	gN/m ³	Y_{hb}	0.630	gDQObm/ gDQOsf
b_{ab}	0.015	d ⁻¹	K_{Oh}	0.200	gO ₂ /m ³
b_{fb}	0.020	d ⁻¹	μ_{ab}	2.000	d ⁻¹
b_{asrb}	0.012	d ⁻¹	i_{nxi}	0.030	gN/gDQOxi
b_{amb}	0.008	d ⁻¹	K_{Oab}	0.500	gO ₂ /m ³

El rango de variación de los parámetros incierto es 12.5%, excepto para K_a que es 27.5% (para contemplar las grandes diferencias encontradas en la literatura).

5.4.1 Priorización de Factores

Para obtener predicciones adecuadas con modelos matemáticos complejos que involucran variables ambientales y biológicas, es necesario una etapa de calibración con datos experimentales. Un paso anterior a la calibración es la selección de los factores o parámetros de entrada que generen la mayor reducción esperada en la varianza de la salida del modelo (Saltelli & Tarantola, 2002). Un ranking de los índices de sensibilidad de orden decreciente, permite identificar los parámetros más relevantes del modelo, que serán aquellos a determinar en el problema de estimación de parámetros.

Los resultados numéricos del modelo a partir del análisis de sensibilidad global dinámico indican que, a pesar de la complejidad del modelo, solo dos parámetros (θ y k_m) explican gran porcentaje de la varianza de las variables de estado de salida. Los rangos de reducción esperada en la varianza de las variables de salida del modelo si θ se pudiera fijar en su valor verdadero son 100%-67%, 100%-61% y 100%-13% en la primera laguna aeróbica, en la segunda laguna aeróbica y en la facultativa, respectivamente. En las Figuras 38(a) a (d) se muestran los valores máximos, mínimos

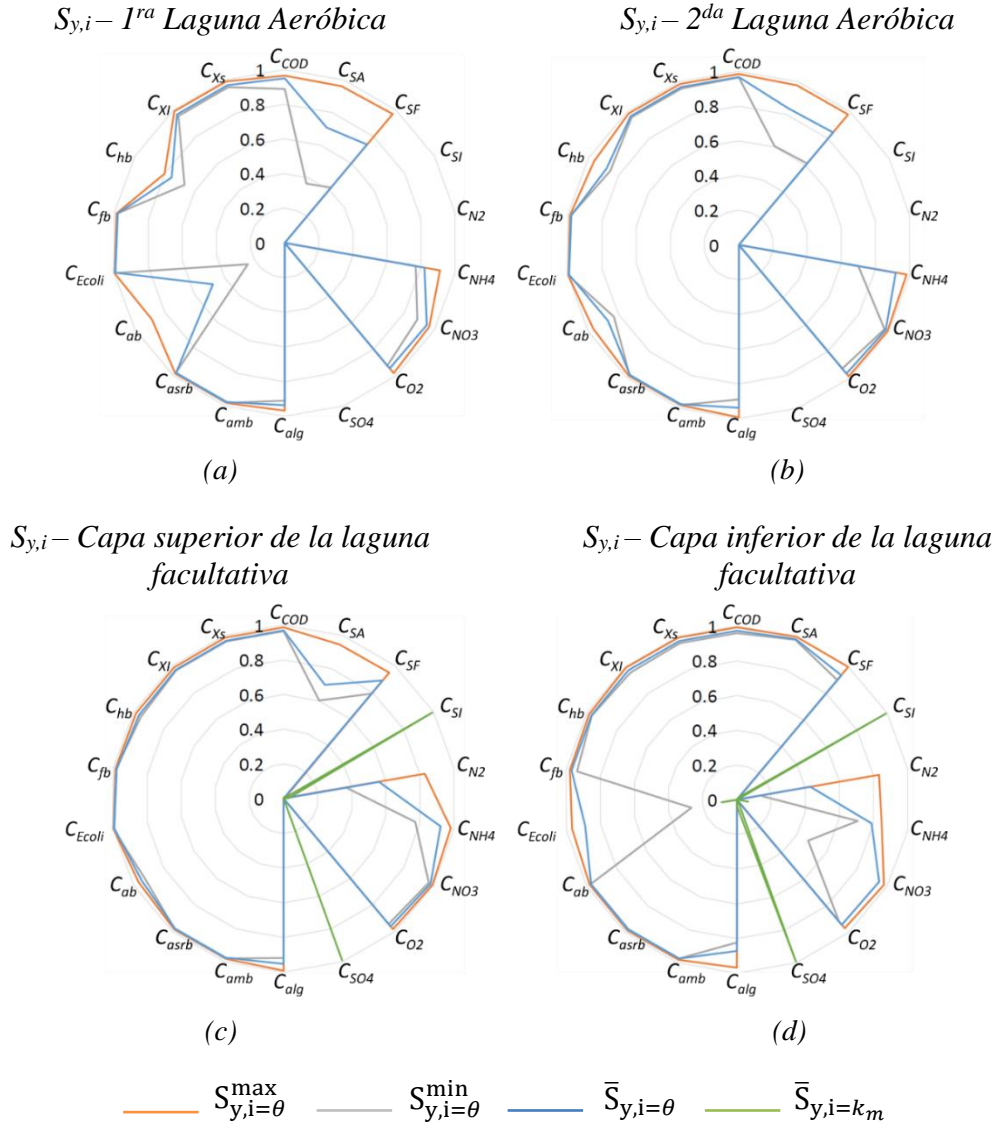


Figura 38. Valor máximo ($S_{y,i}^{max}$), mínimo ($S_{y,i}^{min}$) y promedio en el tiempo ($\bar{S}_{y,i}$) del índice de sensibilidad de primer orden para el coeficiente en la función de limitación por temperatura (θ) en la primera (a) y segunda (b) laguna aeróbica. Y en la capa superior (c) e inferior (d) de la laguna facultativa también se muestra el valor promedio en el tiempo $\bar{S}_{y,i}$ del coeficiente de transferencia de masa entre capas (k_m).

y promedios en el tiempo del índice de sensibilidad de primer orden de todas las variables de estado diferenciales en todo el sistema de lagunas con respecto al coeficiente en la función de limitación por temperatura ($S_{y,i=\theta}$). Mientras que en las Figuras 38(c) y (d), también se muestra el valor promedio de dicho índice con respecto al coeficiente de transferencia de masa entre capas ($\bar{S}_{y,i=k_m}$), que solo tiene relevancia tanto en la capa superior e inferior de la laguna facultativa.

Por ejemplo, se puede observar que para la concentración de materia orgánica (C_{DQO}) en la primera laguna aeróbica, θ explica casi toda la varianza de salida a lo largo de todo el horizonte de tiempo ya que alcanza un valor de S_i máximo, mínimo y promedio de 0.966, 0.889 y 0.949, respectivamente. Mientras que los valores de S_i para θ en el caso de la concentración de bacterias autotróficas alcanza un valor máximo de 0.885, mínimo de 0.247 y promedio de 0.478 en la misma laguna. (Figura 38 (a)).

Además, en la Figura 38 se puede observar que el coeficiente θ domina los efectos de primer orden para 15 de las 18 variables de estado diferenciales de cada laguna. La influencia de este parámetro no es solo de primer orden, sino que también es importante a través de sus efectos de interacción con otros parámetros (Tabla A.1. 2). Otros modelos matemáticos de sistemas ecológicos también se ven altamente influenciados por los parámetros de ajuste de temperatura. Esto es un resultado esperado ya que la temperatura ejerce una gran influencia sobre los procesos biológicos llevados a cabo por los microorganismos modelados (Estrada & Diaz, 2010). Por lo tanto, destinar los mayores esfuerzos en la determinación adecuada de este parámetro puede llevar a grandes reducciones en la varianza incondicional de las variables de estado que describen el sistema de tratamiento de aguas residuales. En la mayor parte de las variables de estado (Figuras 40(a), 41(a) y (c), 42(a) y (c), 43(a) y 44(a)), los efectos de primer orden de θ son mayores al inicio del proceso y decrecen hasta alcanzar el valor mínimo al tiempo final de la simulación. Con esta disminución en la influencia de θ , hay un ligero aumento en los efectos de primer orden y de interacción entre otros parámetros.

Las Figuras 38(a) y (b), muestran que los valores de los índices de sensibilidad de primer orden de θ para las variables C_{N2} , C_{SO4} y C_{SI} son nulos en las lagunas aeróbicas. Esto se debe a que los primeros dos compuestos solo son producidos por microorganismos

anaeróbicos y el último compuesto está involucrado solamente en los procesos de hidrólisis, que se desarrollan en ambientes anaeróbicos. Un parámetro relevante para C_{SO4} y C_{SI} es el coeficiente de transferencia de masa entre capas (k_m) en la laguna facultativa (Figuras 38 (c) y (d)), explicando hasta el 100% de la varianza de dichas variables. Es decir, si k_m pudiera fijarse en su valor verdadero, se alcanzaría una reducción de hasta el 100% de la varianza esperada de salida de dichas variables.

Cabe destacar, que a partir del análisis de sensibilidad global también se pueden identificar los parámetros que pueden fijarse en cualquier valor dentro de su rango de variación ya que no tienen efectos sobre la varianza de salida del modelo ((Saltelli & Tarantola, 2002), (Homma & Saltelli, 1996)). Los parámetros irrelevantes del modelo, con valores nulos o bajos de los índices de sensibilidad que pueden fijarse en su valor nominal, son K_{NHh} , K_{NHa} , K_{Oab} , b_{ab} , b_{fb} , b_{amb} , b_{alg} y i_{nxi} . En la Figura 39, se resumen visualmente los resultados obtenidos.

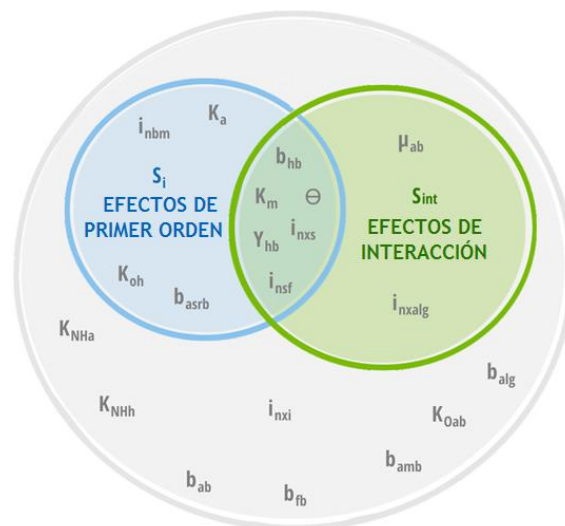


Figura 39. Visualización de la relevancia de los parámetros del modelo.

A continuación, se presenta una discusión más detallada de los resultados obtenidos para cada laguna mediante gráficos acumulativos de los perfiles temporales de los índices de primer orden y de interacción para las principales variables de estado diferenciales que

describen el sistema de lagunas de estabilización. Se muestran los perfiles acumulativos de los índices de sensibilidad para aquellas variables que presentan mayores valores de los índices de sensibilidad de interacción y cuyas varianzas están constituidas por la contribución de otros parámetros aparte de θ y k_m (Figuras 40 a 44).

En las tablas del Anexo 1 se presenta un reporte completo de los valores máximos, mínimos y promedios en el tiempo de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para las 72 variables de estado del modelo de lagunas de tratamiento de aguas residuales.

5.4.2 Laguna Aeróbica 1

La primera laguna recibe la corriente de aguas residuales con la mayor cantidad de materia orgánica. Este hecho tiene un impacto en los perfiles de los índices de sensibilidad, resultando en mayores efectos de interacción entre los parámetros de la laguna. En las Figuras 40 y 41 se muestran los perfiles temporales para los índices principales de la laguna.

Como se mencionó anteriormente, los efectos de primer orden están dominados por el coeficiente de temperatura θ a lo largo de todo el tiempo de operación (Figuras 40(a) y (c), 41(a) y (c)). Dicho parámetro también domina los efectos de interacción, como se puede apreciar en las Figuras 40 (b), (d) y (e), y Figuras 41 (b) y (d).

En relación con las concentraciones de los productos de la fermentación (C_{SA}) y el sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}), los perfiles de los índices de sensibilidad obtenidos son similares (Figuras 40(a)-(d)), los procesos en los que están implicados estos componentes se encuentran descritos por expresiones cinéticas similares.

Otro parámetro relevante (aparte de θ) es la fracción de nitrógeno en el sustrato particulado lentamente biodegradable, i_{nxs} , que representa hasta un 25% de la varianza total de ambas variables de estado con una mayor influencia al final del horizonte de tiempo. Le sigue en relevancia la fracción de nitrógeno en el sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, i_{nsf} , que significa hasta un 7.5% de la varianza de las variables. El coeficiente de rendimiento de las bacterias heterotróficas, Y_{hb} , y el coeficiente de saturación/inhibición del nitrógeno amoniacal para las bacterias autotróficas, K_{NH_4} , tienen una contribución baja en las varianzas totales de salida de hasta 3.5%.

Los efectos de interacción nuevamente son dominados por θ , alcanzado un valor de $S_{i,int}^{max}$ de 0.25 (Figuras 40(b) y (d)). Hay cierta influencia por parte de los parámetros Y_{hb} y μ_{ab} , la velocidad máxima de crecimiento de las bacterias autotróficas, durante todo el tiempo de simulación. Mientras tanto, i_{nxs} , i_{nsf} , K_{NHa} y K_{Oab} , coeficiente de saturación/inhibición del oxígeno para las bacterias autotróficas, son parámetros con influencia baja a través de sus interacciones, con valores de \bar{S}_{int} entre 0.011 a 0.022.

En la Figura 40(e) se presenta el perfil de los índices de sensibilidad de interacción para la concentración nitrógeno amoniacal (C_{NH4}). En este caso, los efectos de interacción están dominados por Y_{hb} y θ , con valores máximos de $S_{i,int}$ de 0.24 y 0.21, respectivamente. Los parámetros μ_{ab} y K_{Oab} también contribuyen a dichos efectos, pero en menor medida.

En relación a las variables relacionadas con la biomasa, se muestran los perfiles de los índices de sensibilidad para la concentración de las bacterias autotróficas (C_{ab}) y heterotróficas (C_{hb}) en la Figura 41. En el caso de C_{ab} , su varianza está compuesta por varios parámetros. θ contribuye hasta un 88.5% al principio del proceso, con un valor promedio en el tiempo de 48%. i_{nxs} y μ_{ab} le siguen en relevancia, contribuyendo hasta un 10% cada uno en la varianza de salida al final del proceso. Hay una contribución promedio de K_{Oab} , K_{Oh} y i_{nsf} de alrededor del 3.5 % cada uno. Finalmente, los parámetros K_{NHa} y b_{ab} tienen una escasa contribución. Por otro lado, se pueden apreciar efectos de interacción fuerte en la varianza de salida de la concentración de las bacterias autotróficas en la Figura 41 (b), alcanzado un $\sum S_{i,int}$ de 0.7. Dichos efectos se describen principalmente por la contribución de θ y i_{nxs} durante todo el horizonte de tiempo, con contribuciones menores de Y_{hb} , b_{alg} y i_{nalg} .

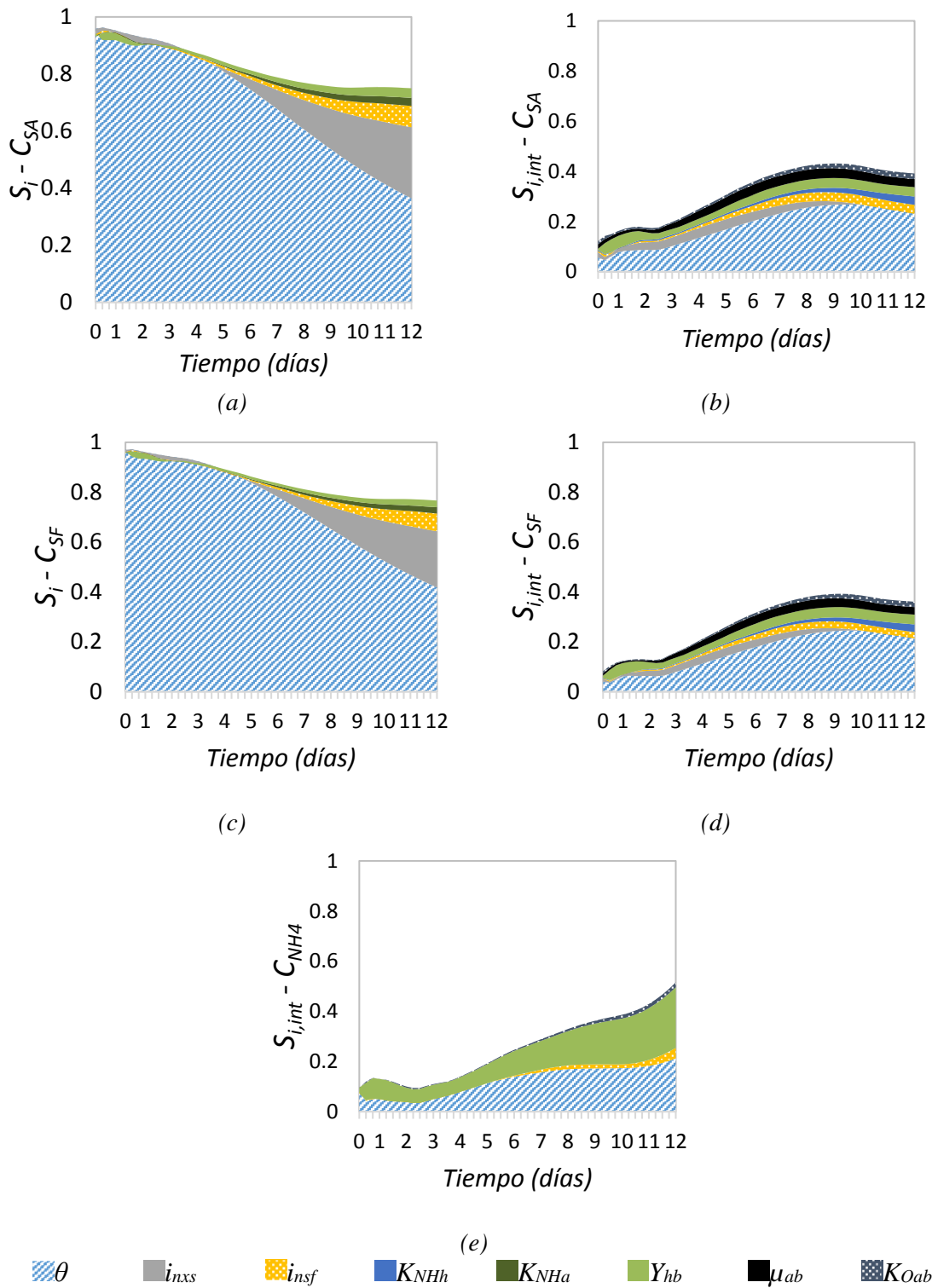
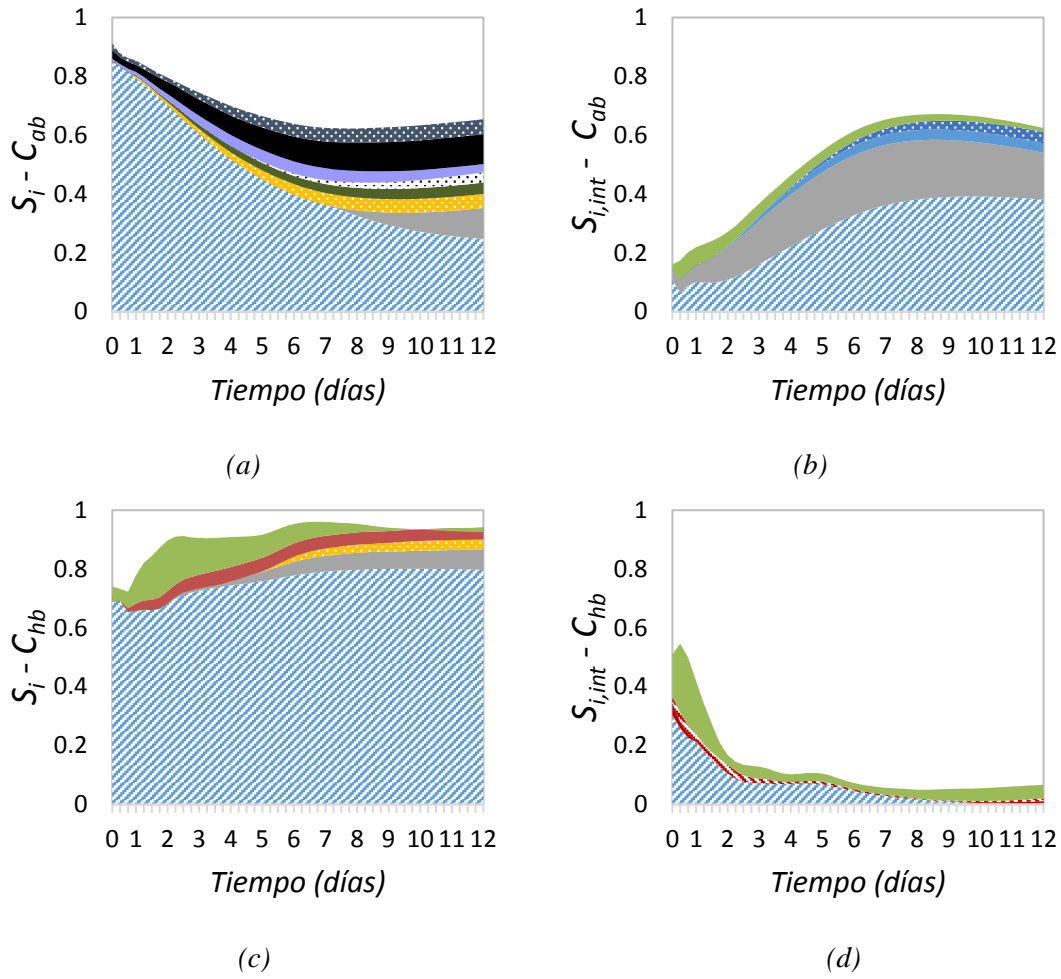


Figura 40. Laguna Aeróbica 1: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) y del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (c y d); y perfiles de sensibilidad de interacción para la concentración de nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).



θ i_{nxs} i_{nsf} K_{NH4} b_{ab} i_{nxa} b_{hb} K_a b_{alg} K_{Oh} Y_{hb} μ_{ab} K_{Oab}

Figura 41. Laguna aeróbica 1: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para las bacterias autotróficas (C_{ab}) (a y b) y heterotróficas (C_{hb}) (c y d).

En el caso de la concentración de las bacterias heterotróficas (C_{hb}), θ domina los efectos de primer orden con un valor promedio de 75.5% y Y_{hb} contribuye hasta un 17.2%, especialmente al principio del proceso. b_{hb} y i_{nxs} siguen en importancia, con valores de \bar{S}_i de 0.04 y 0.036, respectivamente, y una contribución muy baja de i_{nsf} .

C_{hb} también presenta fuertes efectos de interacción entre parámetros ($\sum S_{i,int}$ hasta 0.6) al principio de la operación (Figura 41 (d)). Este tipo de efectos se describen nuevamente con las contribuciones de θ y Y_{hb} principalmente, que alcanzan valores de $S_{i,int}^{max}$ de 0.303 y 0.235, respectivamente, mientras que sus valores de \bar{S}_{int} son 0.064 para el primero y

0.05 para el último. Finalmente, la contribución de b_{hb} y K_a a los efectos de interacción es escasa.

5.4.3 Laguna Aeróbica 2

La segunda laguna del sistema de tratamiento es también aeróbica, pero con un nivel menor de materia orgánica ya que recibe una corriente que fue tratada en la primera laguna aeróbica.

Los perfiles de sensibilidad de primer orden y de interacción de C_{SA} y C_{SF} son similares a aquellos obtenidos para la primera laguna aeróbica. Sin embargo, la contribución de θ a la varianza de salida es mayor, y hay menor número de parámetros que contribuyen a la varianza de estas variables de estado. Los efectos de primer orden para ambas variables están dominados por θ , con un valor de \bar{S}_i alrededor de 0.85; i_{nxs} alcanza un valor de S_i^{max} de 0.102 al final del horizonte de tiempo. En tanto, los parámetros i_{nsf} y Y_{hb} contribuyen a las varianzas de salida hasta un 2.7% (Figura 42(a) y (c)). En esta laguna, los efectos de interacción no son tan elevados como en la anterior, alcanzado un $\sum S_{i,int}$ de 0.4. Nuevamente, θ es el parámetro más relevante a través de sus efectos de interacción con un \bar{S}_{int} de 0.12. Se puede observar una contribución similar de los parámetros i_{nxs} , μ_{ab} , Y_{hb} y i_{nsf} en las Figuras 42 (b) y (d), con un $S_{i,int}^{max}$ de alrededor de 0.035. Todos estos resultados están en línea con la menor cantidad de materia orgánica presente en la segunda laguna.

En el caso del perfil de los índices de interacción de C_{NH_4} , la influencia creciente en el final del proceso se repite, como se puede ver en las Figuras 40(e) y 42(e). Incluso cuando $\sum S_{i,int}$ alcanza un valor de 0.8, los efectos de interacción se concentran en un período de tiempo corto, con valores de $S_{i,int}^{max}$ de θ de 0.5, seguido por Y_{hb} ($S_{i,int}^{max} = 0.17$) y K_{NH_4} ($S_{i,int}^{max} = 0.095$). También hay una contribución baja de K_a , μ_{ab} y K_{Oab} .

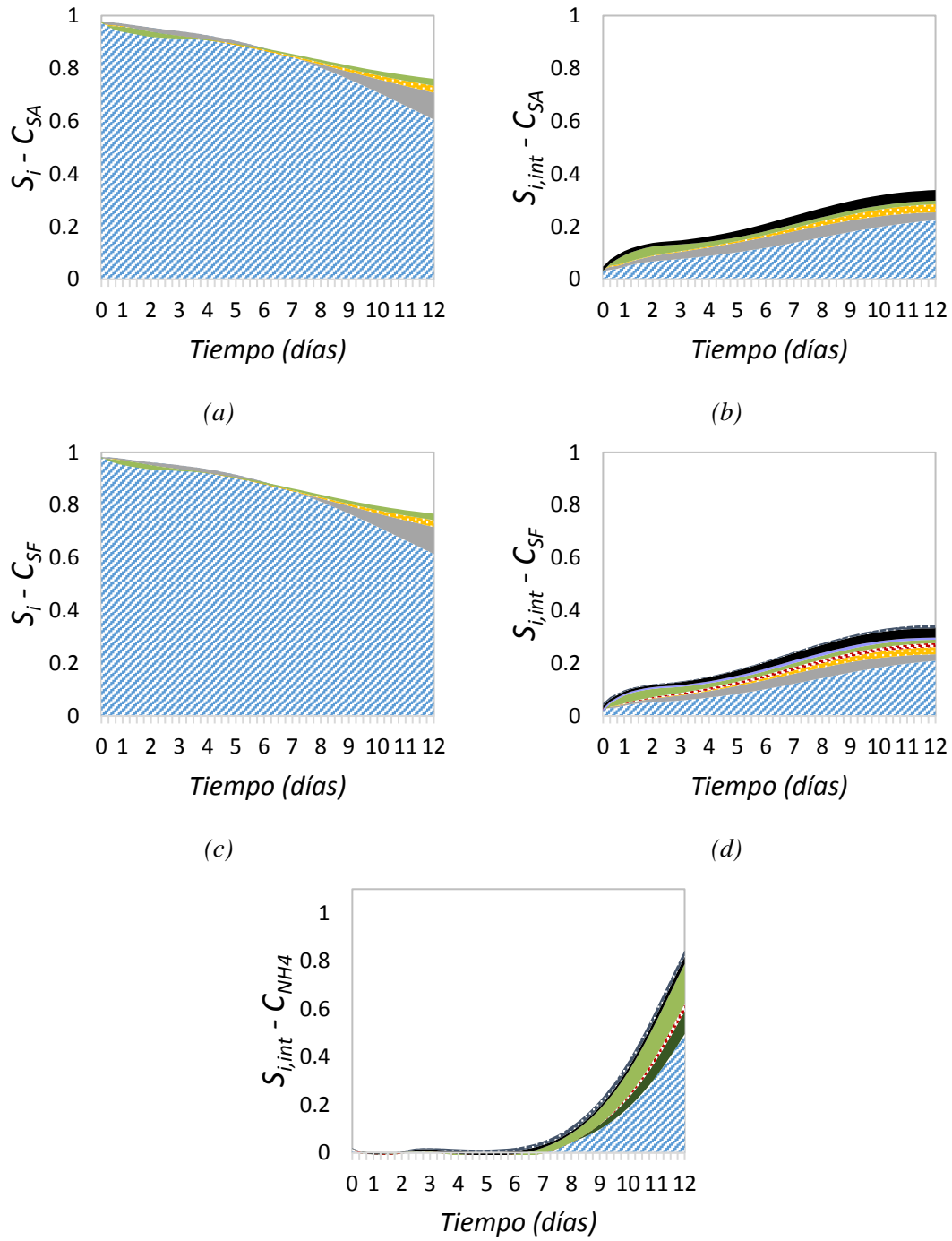


Figura 42. Laguna Aeróbica 2: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) y del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (c y d); y perfiles de sensibilidad de interacción para la concentración del nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).

Los perfiles de los índices de sensibilidad de la concentración de las bacterias heterotróficas y autotróficas no se muestran para esta laguna, ya que están dominados

principalmente por θ , como se puede apreciar en el gráfico radial de los índices de primer orden de la Figura 38, y en las Tabla A.1.1 y Tabla A.1. 2.

5.4.4 Capa Superior de la Laguna Facultativa

La laguna facultativa recibe la materia orgánica que no pudo ser degradada en las lagunas aeróbicas y se modela considerando dos capas horizontales a fin de diferenciar las distintas zonas de la laguna y sus procesos asociados. La capa superior es un ambiente aeróbico, mientras que la inferior es anaeróbica.

En la Figura 43 (a) se presenta el perfil de los índices de sensibilidad de primer orden para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}). En este caso, el parámetro θ es el más relevante cuyo valor de S_i corresponde a 0.7. Se puede apreciar una contribución considerable a la varianza por parte de Y_{hb} de hasta un 12.3%, especialmente durante el tercer día de operación. Además, i_{nxs} y K_{NH4} contribuyen a la varianza hasta un 5% cada uno, mientras que la contribución por parte de K_a , K_{Oh} y μ_{ab} es baja, con un S_i^{max} de alrededor de 0.027.

Al tratarse de un ambiente aeróbico, se pueden encontrar muchas similitudes entre los perfiles de los índices de sensibilidad de interacción C_{SA} , C_{SF} y C_{NH4} (Figuras 43 (b), (e) y (f)) en la capa superior de la laguna facultativa y la segunda laguna aeróbica.

En relación a la concentración de nitrógeno gaseoso (C_{N2}), los efectos de primer orden están dominado por θ y Y_{hb} , con valores de \bar{S}_i de 0.56 y 0.35, respectivamente. Les siguen en relevancia k_m y K_{Oh} , que alcanza valores de S_i de 0.046 y 0.025, respectivamente (Figura 43(c)). Los efectos de interacción para estas variables se describen principalmente a través de las contribuciones de Y_{hb} y b_{hb} , con valores de \bar{S}_{int} de alrededor de 0.036. En este caso la contribución de θ y k_m es baja y solo se aprecia al principio del proceso.

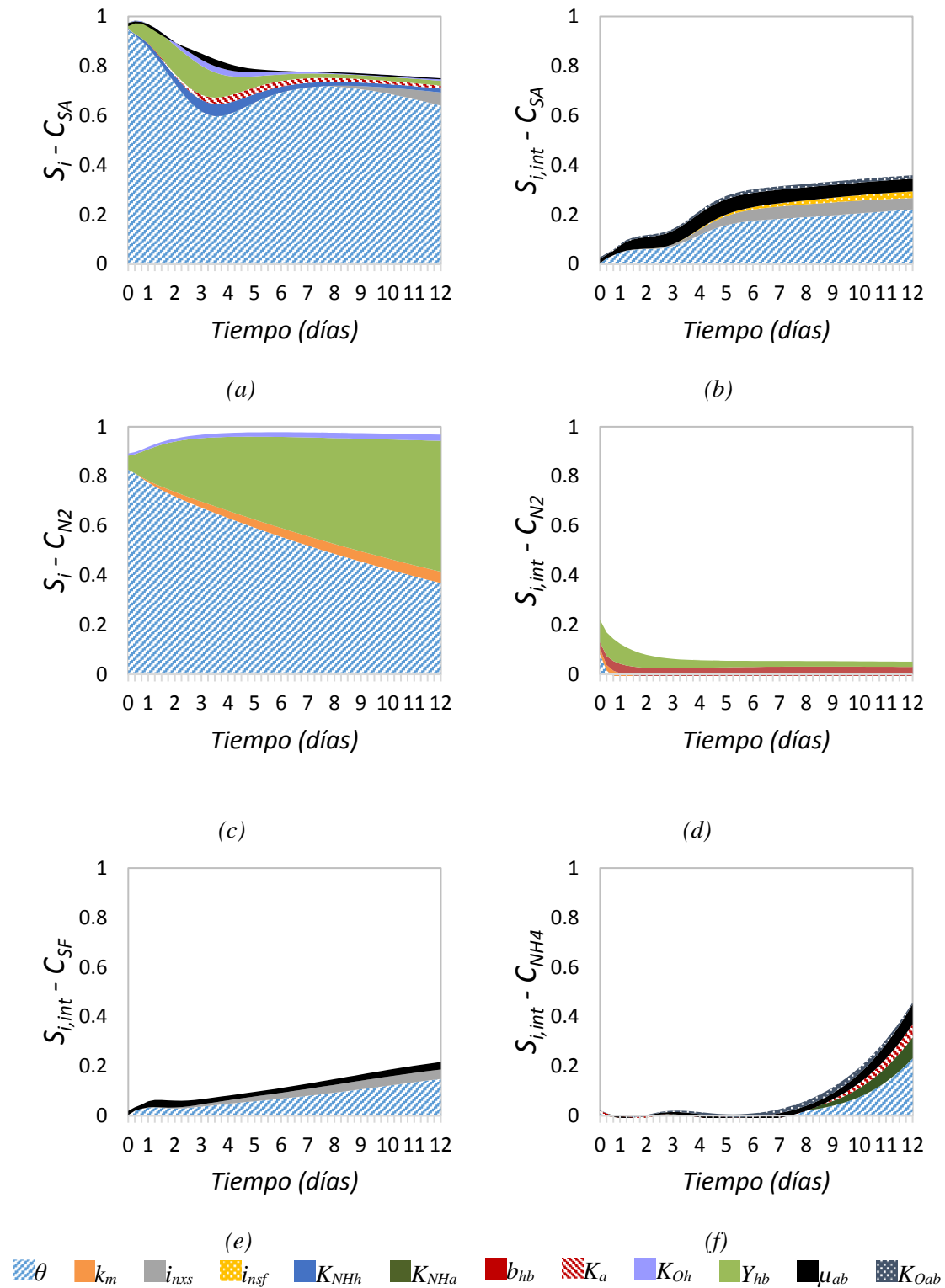


Figura 43. Capa superior de la laguna facultativa: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de los productos de la fermentación (C_{SA}) (a y b) de nitrógeno gaseoso (C_{N2}) (c y d); perfiles del índice de sensibilidad de interacción para la concentración del sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (C_{SF}) (e) y del nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (f).

5.4.5 Capa Inferior de la Laguna Facultativa

La capa inferior de la laguna facultativa es un ambiente anaeróbico, por lo que procesos como la hidrólisis y el crecimiento de organismos anaeróbicos estrictos solo ocurren en esta parte del sistema.

Solo se presentan los resultados numéricos para variables relacionadas con los nutrientes en las Figuras 44 (a) a (e) a fin de mostrar los efectos de interacción entre parámetros.

Para el resto de las variables de estado de la capa inferior, solo θ y k_m tienen influencia en las varianzas de salida del modelo (Figura 38(d)) y las interacciones entre los parámetros no son relevantes (Tabla A.1. 2)

En las Figuras 44 (a) y (b) se puede observar los perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de nitrógeno gaseoso (C_{N_2}). Al principio del proceso, los efectos de primer orden están principalmente dominados por θ , que explica casi el 80% de la varianza de salida de C_{N_2} y decrece a lo largo del tiempo hasta llegar a un 20%. Mientras la importancia de θ decrece, la contribución de Y_{hb} , el coeficiente de rendimiento de las bacterias heterotróficas se incrementa, ya que dichos organismos se encargan de hidrolizar la materia orgánica. También K_{Oh} contribuye, pero en menor medida. Los efectos de interacción no son altos ($\sum S_{int} < 0.25$) e involucran la contribución de Y_{hb} , b_{hb} , y θ . Ambos perfiles son similares a los obtenidos en la capa superior, pero sin la contribución de k_m en la concentración de nitrógeno gaseoso en la capa inferior.

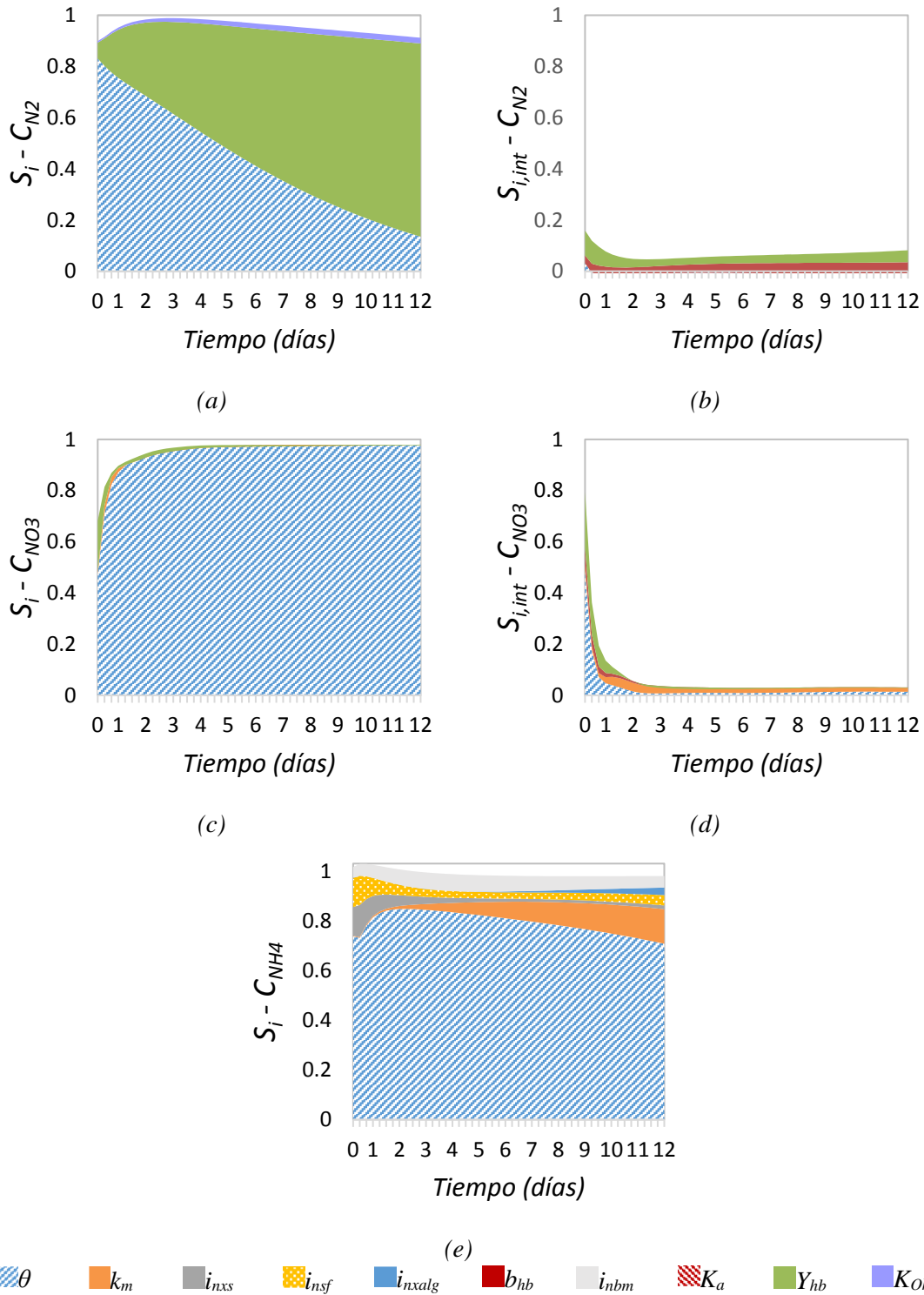


Figura 44.Capa inferior de la laguna facultativa: Perfiles de los índices de sensibilidad de primer orden y de interacción para la concentración de nitrógeno gaseoso (C_{N2}) (a y b) y de nitrato (c and d) (C_{NO3}); y perfil del índice de sensibilidad de primer orden para la concentración de nitrógeno amoniacal (C_{NH4}) (e).

En el caso de C_{NO3} , los efectos de primer orden están dominados por el parámetro θ , presentado un valor de \bar{S}_i de 0.95 como se puede observar en la Figura 44(c). Y_{hb} aporta

hasta un 20% a la varianza de la variable de estado, pero solamente al principio del horizonte de tiempo. Además, el coeficiente de transferencia entre capa tiene una contribución baja, también al principio del proceso. Por otro lado, esta variable presenta efectos de interacción fuertes entre los parámetros inciertos del modelo, alcanzando un valor de $\sum S_{i,int}$ de 0.8 concentrado en el primer día de operación (Figura 44 (d)). θ es nuevamente el parámetro más relevante con valores de $S_{i,int}^{max}$ de 0.49 y de \bar{S}_{int} de 0.022. Hay una contribución importante por parte de Y_{hb} ($S_{i,int}^{max}=0.22$) y, en menor medida, de k_m y b_{hb} .

Finalmente, en la Figura 44 (e) se presenta el perfil de los índices de sensibilidad de primer orden de C_{NH4} . Nuevamente, θ domina los efectos de primer orden con una contribución de hasta 85% en la varianza de salida, pero también hay una contribución por parte de k_m , i_{nxs} y i_{nsf} , de hasta un 14%, 13% y 12%, respectivamente. Y una menor aun contribución de i_{nalg} y i_{nbm} a la varianza de salida C_{NH4} .

Los resultados obtenidos en este capítulo fueron publicados en Ochoa, Estrada y Hoch (2016 a)

5.5 Conclusiones

En este capítulo, un análisis dinámico de sensibilidad en un modelo de tratamiento biológico de aguas residuales ha permitido determinar los parámetros que tienen mayor influencia sobre las varianzas de las concentraciones de los componentes, considerando tanto los efectos de primer orden como los de interacción entre parámetros a lo largo de todo el tiempo de operación. Se ha implementado un modelo matemático mecanístico de un sistema de lagunas de estabilización (*aeróbica-aeróbica-facultativa*) que incluye 72 ecuaciones diferenciales en un entorno orientado a ecuaciones (PSEnterprise Ltd., 2014). Se han obtenido los perfiles temporales de los índices de sensibilidad global realizando

simulaciones estocásticas en gPROMS y exportando los perfiles de las concentraciones a fin de calcular los índices de primer orden, totales y de interacción en cada instante de tiempo dentro del entorno de Fortran 90.

El conocimiento profundo de las contribuciones de los parámetros del modelo a la varianza incondicional de las variables de estado diferenciales proporciona información útil para la estimación de parámetros. El coeficiente en la función de limitación por temperatura, θ , es el parámetro más influyente del modelo a lo largo de todo el horizonte de tiempo considerado. Esto indica la necesidad de obtener una muy buena estimación de este parámetro. Además, es importante estimar adecuadamente otros parámetros como k_m y Y_{hb} , a fin de evitar sus efectos de primer orden que explican el 100% de la varianza en algunos intervalos de tiempo para las principales variables de salida. Dicha información fue crucial para identificar el conjunto de estos tres parámetros que necesitan ser determinados con mayor precisión (*Factor Prioritization*), además permitió la identificación del set de parámetros que no contribuye en la varianza de salida (*Factor Fixing*). Finalmente, es importante destacar que, a pesar de la complejidad del modelo, las interacciones entre parámetros no son elevadas y solo a algunos parámetros se les atribuye la mayor incertidumbre. El presente análisis provee información importante para la formulación adecuada del problema de estimación de parámetros de un sistema de lagunas de estabilización de aguas residuales.

DISEÑO ÓPTIMO DE SISTEMAS DE TRATAMIENTO BIOLÓGICO DE AGUAS RESIDUALES

6.1 Introducción

El diseño de redes de tratamiento de agua es un tema principal en el área de ingeniería de procesos, cuyo interés se ha incrementado por la escasez de las fuentes de agua dulce junto con las estrictas regulaciones de descarga de aguas residuales. Las redes de tratamiento de aguas residuales consisten en una serie de procesos de regeneración y tratamiento, donde hay otros elementos importantes como los afluentes y efluentes de todo el proceso; los mezcladores y divisores de flujo para distribuir las corrientes en las distintas unidades.

En general, para definir las unidades de tratamiento o regeneración se fija la concentración de salida o bien la eficiencia de remoción de contaminantes (Jezowski, 2010). El uso de estos modelos excesivamente simplificados impide la aplicación de las herramientas desarrolladas para el diseño de procesos industriales y además puede llevar a resultados inadecuados (Nezungai & Majozi, 2015). Solo algunos trabajos consideran modelos más detallados, por ejemplo, Yang, Salcedo-Diaz y Grossmann (2014), quienes proponen la incorporación de modelos '*short cut*' en la descripción de la transferencia de masa de contaminantes en las unidades de distintos tratamientos de agua residual

incorporados dentro de una superestructura, produciendo de este modo una mejora en todo el proceso de diseño.

La generación de agua residual es inevitable y su descarga en cuerpos de agua conlleva a problemas ambientales tales como la eutrofización, pérdida de biodiversidad, malos olores, disminución del oxígeno disuelto, e incluso riesgos para la salud humana. Por estas razones junto con la creciente preocupación ambiental, los estándares de vertidos de aguas residuales se han vuelto más estrictos (Sah, Rousseau, & Hooijmans, 2012). Los sistemas de lagunas de estabilización ofrecen una solución simple y económica para el tratamiento de aguas residuales y son una tecnología adecuada y generalizada en los países en vías de desarrollo, especialmente en las áreas rurales. En general, tienen costos de inversión y mantenimiento bajos. El objetivo principal del tratamiento de aguas residuales es convertir los desechos en productos finales estables que puedan ser descargados en cursos de agua dulce o costas en forma segura. El tratamiento de aguas residuales en las lagunas de estabilización resulta principalmente de la sedimentación y la simbiosis compleja de la acción de las bacterias y de las algas, donde la oxidación de la materia orgánica es llevada a cabo por las bacterias en presencia del oxígeno disuelto provisto por la fotosíntesis algal y la re-aireación superficial (Beran & Kargi, 2005). La calidad requerida del efluente junto con su volumen determina las unidades del proceso en el diseño de una planta de tratamiento de efluentes (Gray, 2004). En general, se trata de una combinación de tres tipos distintos de lagunas: anaeróbicas, facultativas y aeróbicas o de maduración, que se clasifican en función del tipo de actividad biológica predominante.

Las lagunas anaeróbicas se diseñan principalmente para mejorar la sedimentación y la posterior eliminación de carga orgánica a través de la digestión anaeróbica de los sólidos orgánicos particulados. El proceso de remoción de carga orgánica se debe a un efecto

combinado de sedimentación y degradación biológica vía: hidrólisis, acidogénesis, acetogénesis y metanogénesis. En las lagunas facultativas, se produce remoción de carga orgánica y de nutrientes, pero también se remueven patógenos. La simbiosis entre las algas fotosintéticas y las bacterias heterotróficas es la característica fundamental de este tipo de lagunas. Finalmente, las lagunas aeróbicas son de menor profundidad y se mantiene un ambiente aeróbico en toda la laguna (Sah *et al.*, 2012).

El diseño de sistemas de lagunas de estabilización no ha sido sistemáticamente abordado en la literatura. Algunos trabajos incluyen heurísticos y sugerencias de dimensiones para cada tipo de laguna, en función de las condiciones climáticas, considerando cinéticas simples ((Mara, 2003), (Spellman & Drinan, 2014)). Por ejemplo W. Medri y V. Medri (2002) minimizaron los costos de un sistema de lagunas de estabilización con la restricción de una eficiencia de remoción deseada, considerando únicamente una cinética de primer orden para el consumo de DBO. Mientras que von Sperling (2007) abordó la tecnología del proceso, incluyendo eficiencias de remoción esperadas y criterios de diseño basados en datos experimentales.

Por su parte, Cortés Martínez, Treviño Casino, Alcorta García, Kalashnikov y Luévanos Rojas (2014) optimizaron el diseño y los costos de una laguna facultativa tomando como variables de optimización el tiempo hidráulico y el número de deflectores, con la restricción de concentraciones máximas de DBO y bacterias coliformes. Asimismo, en un trabajo posterior (Cortés Martínez, Treviño Cansino, Sáenz López, González Barrios, & de la Cruz Acosta, 2016) se realizó mismo análisis para una laguna de maduración. Para resolver los problemas de optimización utilizaron el algoritmo de punto interior de MATLAB, pero considerando nuevamente cinéticas de primer orden para ambas restricciones.

En este capítulo, se presenta el diseño de un sistema de lagunas de estabilización utilizando modelos rigurosos para tres distintos tipos de lagunas, basado en balances de materia y ecuaciones cinéticas. Las lagunas se modelan teniendo en cuenta balances de masa de la biomasa algal y de los principales grupos de bacterias: heterotróficas, autotróficas, fermentadoras, acetotróficas reductoras de sulfato y acetotróficas metanogénicas. Además, se formulan balances de masa para la carga orgánica, discriminada en sustrato particulado lentamente biodegradable, sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación, productos de la fermentación y materia orgánica inerte, tanto soluble como particulada. También se plantean balances de masa para los distintos nutrientes tales como amonio, nitrato, sulfato, y oxígeno disuelto. Por último, se consideran procesos de desnitrificación (Sah *et al.*, 2011).

Se formula una superestructura que incorpora los distintos tipos de modelos de lagunas de estabilización para la síntesis y el diseño de un sistema de redes de tratamiento de agua residual. El modelo se introduce como restricciones de igualdad en un problema de programación mixto entero no lineal (MINLP), incorporando además los costos totales anuales y las restricciones de concentración de contaminantes. De este modo es posible determinar la configuración y dimensiones necesarias para cumplir con la legislación de vertido de efluentes. El objetivo es sintetizar y diseñar la red de tratamiento de aguas residuales que minimice los costos totales anuales, sujeto al valor máximo permitido de contaminantes en el efluente. La optimización se lleva a cabo bajo distintos escenarios de carga orgánica inicial a fin de tener en cuenta la incertidumbre del proceso. El análisis de escenarios demuestra que los resultados dependen fuertemente de la concentración de carga orgánica inicial.

Los resultados numéricos proporcionan información sobre las relaciones complejas entre los microorganismos, nutrientes y carga orgánica en la optimización del diseño de un sistema de redes de lagunas de tratamiento de aguas residuales.

6.2 Modelo del Sistema

El sistema de tratamiento de aguas residuales está compuesto por n lagunas en serie con la posibilidad de reciclo. El tipo de laguna puede ser aeróbica, facultativa o anaeróbica, como se describe en la Figura 45. En el Capítulo 4 se describen las cinéticas de reacción y en la Tabla 11 se detallan los procesos que tienen lugar en los distintos tipos de lagunas.

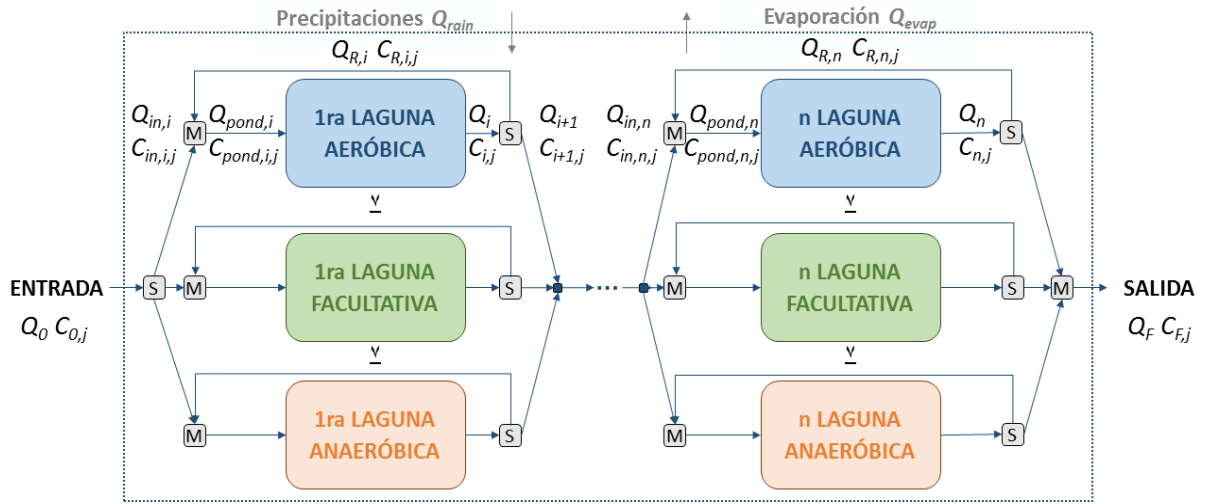


Figura 45. Disposición espacial del sistema de lagunas de estabilización.

A continuación, se detallan los balances de masa en estado estacionario en las lagunas, mezcladores y divisores de corriente del sistema de lagunas.

Balances de masa en las lagunas

$$Q_{Pond,i} - Q_i + Q_{rain,i} - Q_{evap,i} = 0 \quad (76)$$

$$\frac{C_{Pond,i,j} \cdot Q_{Pond,i} - C_{i,j} \cdot Q_i}{V_i} + F_{ij} = 0 \quad (77)$$

Balances de masa en los mezcladores M

$$Q_{Pond,i} = Q_{R,i} + Q_{In,i} \quad (78)$$

$$C_{Pond,i,j} \cdot Q_{Pond,i} = C_{R,i,j} \cdot Q_{R,i} + C_{In,i,j} \cdot Q_{In,i} \quad (79)$$

$$Q_{In,i} = Q_0 \quad i = 1 \quad (80)$$

$$C_{In,i,j} = C_{0,j} \quad i = 1 \quad (81)$$

Balances de masa en los divisores de corriente S

$$Q_i = Q_{R,i} + Q_{In,i+1} \quad i < n \quad (82)$$

$$Q_i = Q_{R,i} + Q_F \quad i = n \quad (83)$$

$$C_{i,j} = C_{R,i,j} \quad (84)$$

$$C_{i,j} = C_{In,i+1,j} \quad i < n \quad (85)$$

$$C_{i,j} = C_{F,j} \quad i = n \quad (86)$$

Donde $Q_{in,i}$, $Q_{pond,i}$, Q_i , $Q_{rain,i}$, $Q_{evap,i}$, $Q_{R,i}$, $Q_{F,i}$ son los caudales volumétricos (m^3/d); $C_{in,i,j}$, $C_{pond,i,j}$, $C_{i,j}$, $C_{R,i,j}$, $C_{F,j}$ corresponden la concentración del componente j en la laguna i (g/m^3), explicados en la Figura 45. V_i es el volumen de la laguna i (m^3) y $F_{i,j}$ es el término de generación y/o consumo del balance.

Como ya se mencionó, las lagunas se clasifican en anaeróbicas, facultativas y aeróbicas según los procesos biológicos que predominan, dependiendo de la concentración de oxígeno dentro de la laguna. Alasino, Mussati, Scenna y Aguirre (2010) definen el tipo de reactor con el valor obtenido del coeficiente de transferencia de oxígeno k_{la} en el diseño de sistemas de barros activados. Sin embargo, en este trabajo se asocian variables binarias, $y_{type,i}$, no solo a los distintos tipos de procesos a través de una formulación *Big M* (Ec. (87)) sino que también se asocian dichas variables binarias a las distintas cotas de las dimensiones que pueden tomar las lagunas para determinar la configuración del sistema. Finalmente, se incorpora una restricción lógica que asegura la existencia de solo

un tipo de laguna en el sistema resultante a través de la restricción lógica de la ecuación (88).

$$\rho_{k,i} - y_{type,i} \cdot M \leq 0 \quad k \in type, type = anaer, fac, aer \quad (87)$$

$$\sum_{type} y_{type,i} = 1 \quad (88)$$

Donde $\rho_{k,i}$ es el proceso k asociado a la laguna i ; *anaer*, *fac* y *aer* representan los sets de procesos anaeróbicos, facultativos y aeróbicos, respectivamente.

Para este estudio, se consideran $n=3$ lagunas, $j=18$ componentes detallados en la Tabla 10, y $k=19$ procesos listados en la Tabla 12. En la Tabla 15 se encuentran los términos de generación y consumo para los distintos componentes, mientras que en la Tabla 13 se describen todos los parámetros del modelo.

6.3 Modelo Económico

La función objetivo a minimizar es el costo total del sistema de lagunas de estabilización, sujeto a las regulaciones ambientales de descarga de efluentes. El costo total es la suma de los costos de capital y de operación, considerando el costo de la tierra, de construcción, de revestimiento y de mantenimiento del sistema. Las expresiones para cada tipo de costo, propuestas por Medri, Costa, Medri, y Belli Filho (2007), se describen a continuación.

El área total se considera como el área ocupada por las lagunas más un 50% para las áreas de circulación aledañas. Los costos de construcción incluyen la limpieza del terreno, la excavación mecánica y el transporte de exceso de tierra. Se consideran los costos de revestimiento utilizando PVC flexible. La mitad del área se considera dentro de los costos de mantenimiento. Tomando una vida útil de 10 años, los costos se pueden calcular en la fecha de la inversión utilizando la Ec. (92). La función objetivo para la minimización de los costos totales se describe con la ecuación (94).

$$C_{l,i} = 1.5 \cdot P_l \cdot A_i \quad (89)$$

$$C_{c,i} = \alpha + \beta \cdot V_i \quad (90)$$

$$C_{r,i} = \mu + \nu \cdot V_i \quad (91)$$

$$C_{m,i} = 0.5 \cdot \phi \cdot (\eta + \tau \cdot A_i) \quad (92)$$

$$\phi = \frac{(1+r)^t - 1}{r \cdot (1+r)^t} \quad (93)$$

$$\min C_t = \sum_i^n C_{l,i} + C_{c,i} + C_{r,i} + C_{m,i} \quad (94)$$

donde $C_{l,i}$, $C_{c,i}$, $C_{r,i}$ y $C_{m,i}$ son el costos de la tierra, de construcción, de revestimiento y de mantenimiento asociado a la laguna i (USD), respectivamente; C_t es el costo total del sistema; P_l es el precio de la tierra (USD/m²) y A_i es el área de la laguna i (m²); α , μ y η son los coeficientes lineales (USD); β y ν son los coeficientes angulares (USD/m³). τ es otro coeficiente angular (USD/m²); ϕ es el factor del valor presente, r es la tasa de interés anual y t es la vida útil del servicio proporcionado por el sistema de lagunas de estabilización; n es el número de lagunas.

El modelo resultante es un problema de programación no lineal mixto entera (MINLP) y fue implementado en GAMS (Brooke, Kendrick, Meeraus, & Raman, 2012) y resuelto con DICOPT (CONOPT3 para el problema no lineal y CPLEX para el problema lineal mixto entero) (Grossmann, Viswanathan, Vecchietti, Raman, & Kalvelagen, 2002).

6.4 Resultados Numéricos

El modelo MINLP, presentado en las secciones anteriores, se resuelve para determinar el diseño de un sistema de lagunas de estabilización. El escenario base tiene una concentración de entrada de carga orgánica de 353 gDQO/m³, un flujo de entrada de 2000 m³/d, una temperatura de diseño de 15 °C y un precio de la tierra de 3500 USD/ha. El límite de descarga de DQO a cuerpos de agua superficiales actualmente corresponde a

250 gDQO/m³. Sin embargo, en el problema se fijó en 150 gDQO/m³, previendo que las regulaciones en los vertidos serán más exigentes con el transcurso del tiempo.

Los valores de los coeficientes lineales α , μ y η son 274.5, 315.3 y 31.6 USD, respectivamente; los coeficientes angulares β y ν son 2.027 y 1.20 USD/m³, respectivamente, el valor de τ es 0.013 USD/m². Se considera que la tasa de interés anual r es 0.1 y la vida útil t son 10 años (Medri *et al.*, 2007).

La concentración inicial de los componentes se describe en la Tabla 18.

Tabla 18. Concentración de la corriente de entrada a la planta de tratamiento de aguas residuales. $C_{DQO} = C_{SA} + C_{SF} + C_{SI} + C_{Xs} + C_{XI}$ (corresponde al DQO filtrado)

<i>Variable</i>	<i>Concentración inicial</i>	<i>Unidad</i>	<i>Variable</i>	<i>Concentración inicial</i>	<i>Unidad</i>
C_{hb}	20.55	gDQO/m ³	C_{SA}	24.65	gDQO/m ³
C_{alg}	0.50	gDQO/m ³	C_{SI}	30.82	gDQO/m ³
C_{ab}	2.05	gDQO/m ³	C_{SF}	61.64	gDQO/m ³
C_{fb}	20.55	gDQO/m ³	C_{O2}	1.47	gO ₂ /m ³
C_{asrb}	10.27	gDQO/m ³	C_{NH4}	0.69	gN/m ³
C_{amb}	10.27	gDQO/m ³	C_{NO3}	2.06	gN/m ³
C_{Xs}	184.92	gDQO/m ³	C_{SO4}	2.94	gs/m ³
C_{XI}	51.00	gDQO/m ³	C_{DQO}	353.03	gDQO/m ³

La configuración óptima obtenida se presenta en la Figura 46: dos lagunas aeróbicas en serie seguidas por una facultativa y con reciclaje en la primera laguna del sistema. El tipo de variables se define con las variables binarias $y_{aer,i}$, $y_{fac,i}$, e $y_{aer,i}$, explicadas en la sección 6.1. La eficiencia del sistema es superior al 65% con un costo total del USD 52 749. En la Tabla 19 se detallan los distintos costos.

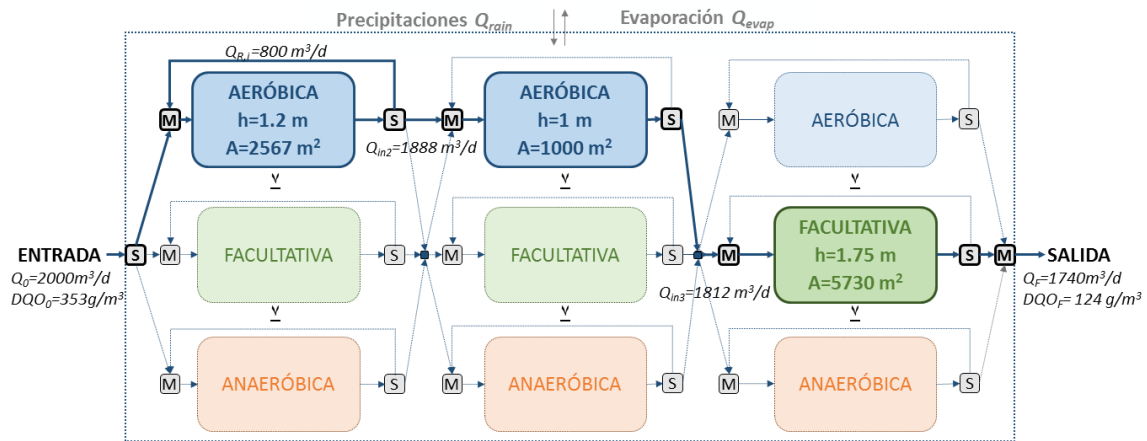


Figura 46. Configuración óptima y las principales variables del proceso para el escenario base: caudales volumétricos: Q_{in} , Q_R , and Q_F (m³/d); concentración de materia orgánica inicial, DQO_{in} , y final, DQO_f (gDQO/m³), profundidad de la laguna: h (m) y área de la laguna: A (m²).

Tabla 19. Costos del sistema (USD).

Variable	Tipo de costo	Laguna 1	Laguna 2	Laguna 3
C_l	Tierra	1347	525	3008
C_c	Construcción	6518	2302	20 545
C_r	Revestimiento	4011	1515	12 315
C_m	Mantenimiento	200	137	326

6.5 Conclusiones

En este capítulo, se llevó a cabo la formulación y resolución de un problema de diseño de sistemas de tratamiento de aguas residuales a través de la construcción de una superestructura con modelos rigurosos de los distintos tipos de lagunas de estabilización, como un caso de programación mixto entera no lineal (MINLP). El objetivo del diseño fue determinar la configuración óptima del sistema, las dimensiones de las lagunas y los caudales de recirculación en caso que sean necesarios, con el mínimo costo total y satisfaciendo las restricciones máximas en las concentraciones del efluente de la planta.

La red propuesta consiste en tres lagunas en serie, pero la misma puede extenderse a cualquier número arbitrario de lagunas.

Los resultados numéricos que se obtuvieron proporcionan información útil acerca de las complejas relaciones entre las variables tecnológicas, biológicas, económicas y ambientales de los procesos en la optimización del diseño de las redes de tratamiento de aguas residuales.

MANEJO DE LAGUNAS DE ESTABILIZACIÓN

7.1 Introducción

Los procesos de tratamiento de aguas residuales contribuyen a minimizar los impactos negativos asociados al crecimiento urbano e industrial, sobre los cuerpos de agua dulce y los ecosistemas costeros. La optimización dinámica a gran escala en las plantas de tratamientos de aguas residuales ya sea utilizando lagunas de tratamiento o lodos activados resulta un desafío por la complejidad de los procesos biológicos junto con el elevado costo computacional, y por la gran variación de caudales y concentraciones de entrada. Las contribuciones en relación a la optimización de este tipo de procesos son escasas, y la mayoría recientes. A continuación, se describen los principales aportes al tema.

Chachuat, Roche y Latifi (2001), y Fikar, Chachaut y Latifi, (2005) formularon un problema de optimización dinámica basado en modelos simplificados de plantas de barros activados (constituidas de un solo reactor y un sedimentador) a fin de determinar la secuencia óptima de aireación que minimiza los costos operativos. Por su parte, Cristea, de Prada, Sarabia y Gutiérrez (2011) optimizaron el mismo sistema, considerando que los equipos de aireación no pueden regular el flujo de aire continuamente. Para ello se plantea la contribución de los aireadores al sistema de forma discreta, siendo este un aporte novedoso.

Recientemente, se abordó el control óptimo multi-objetivo de la misma planta de barros activados a fin de analizar la relación de compromiso entre la calidad del efluente y los costos operativos (Hreiz, Roche, Benyahia, & Latifi, 2015). Las variables de control dependientes del tiempo son el caudal de aire y del desecho de los lodos, mientras que el caudal de recirculación externo es independiente del tiempo. El problema se resolvió con un enfoque de parametrización de las variables de control utilizando algoritmos genéticos. Sin embargo, cuando se incorporaron restricciones de camino a fin de representar mejor los procesos físicos, no se logra alcanzar la concentración deseada de nutrientes en el efluente.

Teniendo en cuenta modelos más complejos, Fuentes, Scenna y Aguirre (2012) abordaron la optimización dinámica de un sistema híbrido basado en reactores discontinuos anaeróbicos y aeróbicos secuenciales para el tratamiento de aguas residuales con el objetivo de minimizar la relación entre el tiempo de reacción y el tiempo total del ciclo, sujeto a las eficiencias de remoción de DQO y N, tomando como variables de control los volúmenes de carga y descarga de los reactores del sistema. Posteriormente, los mismos autores (Fuentes, Aguirre, & Scenna, 2013) llevaron a cabo la optimización de un sistema híbrido a fin de maximizar la velocidad de producción de bio-hidrógeno y remoción de C-N, manipulando los flujos de alimentación, reciclo y cationes, demostrando que se puede incluir un alto número de variables de optimización del proceso, con un costo computacional bajo. En el mismo año Nguyen, Latifi, Lesage y Mulholland (2013) minimizaron la energía de aireación en el sistema completo de la planta BSM1, con restricciones en las concentraciones del efluente mediante la determinación de los perfiles de aireación y caudal de recirculación interno. Originalmente, para introducir los datos de entrada del modelo desarrollaron un objeto externo que permite leer los datos experimentales desde los archivos de entrada, directamente desde gPROMS. En estos tres

últimos trabajos, se utilizaron las herramientas gOPT de gPROMS para realizar la optimización dinámica, que emplea un enfoque de parametrización de las variables de control.

Qiao y Zhang (2016) formularon un problema de optimización dinámica multi-objetivo para el control de procesos de tratamiento de aguas residuales también aplicados al BSM1, lo que les permitió analizar la relación entre el índice de calidad del efluente y la energía consumida. Para ello, controlaron los valores de la concentración del oxígeno disuelto y nitrato en distintos reactores, manipulando la aireación y el caudal de recirculación interna. Este trabajo resulta interesante ya que la mayor dificultad del problema se resuelve mediante el modelado de redes neuronales en línea. Por su parte, Luo y Biegler (2011) formularon un problema de optimización dinámica basado en el mismo modelo de la planta BMS1, a fin de minimizar los costos relacionados con la energía de aireación. El problema de optimización sujeto al sistema de ecuaciones algebraico diferenciales fue implementado en AMPL (Fourer, Gay, & Kernighan, 2004) con un enfoque simultáneo de colocación ortogonal sobre elementos finitos, donde los perfiles de las variables de estado y de control se representan por polinomios a trozos sobre dichos elementos finitos. El NLP resultante se resolvió con IPOPT (Wächter & Biegler, 2006).

Una revisión de trabajos que llevan a cabo optimización dinámica sobre procesos de barros activados puede encontrarse en Hreiz, Latifi y Roche (2015), siendo la principal función objetivo la minimización de los costos y la principal variable manipulada la aireación del sistema. En general, se ha utilizado el enfoque de parametrización de las variables de control para resolver este tipo de problemas.

Por otro lado, se han aplicado estrategias de control a modelos complejos de cuerpos de agua para solucionar el problema de la eutrofización (Estrada, Parodi, & Diaz, 2009). Se

evaluó la aplicación de dos tipos de estrategias de restauración: la remoción de fósforo a través de un humedal artificial y la bio-manipulación basada en la teoría de la cadena trófica. Este problema se resolvió con el programa IPOPT (Wächter & Biegler, 2006), un método de Punto Interior que emplea técnicas de Programación Cuadrática Sucesiva de espacio reducido.

Sin embargo, para el manejo y control de sistemas de lagunas de estabilización, en general, se siguen reglas del pulgar y guías de operación y mantenimiento ((USEPA, 2011), (Spellman & Drinan, 2014), (von Sperling, 2007)). Por lo tanto, hasta la fecha y según nuestro conocimiento, no se ha abordado el estudio del manejo y control de sistemas de lagunas de estabilización en forma sistemática, por lo cual este trabajo constituye una contribución novedosa.

En el presente capítulo se aplican estrategias de control a un modelo de redes de lagunas de estabilización dentro de un marco de optimización dinámica. El modelo utilizado representa los procesos que se llevan a cabo en cuerpos de agua genéricos, desarrollado en el grupo de Ingeniería de Procesos de PLAPIQUI por la Doctora Vanina Estrada (Estrada, 2010) y adaptado a lagunas de tratamiento a partir de datos experimentales obtenidos de las lagunas de tratamiento de la empresa de Jugos S.A., por el Ing. Facundo Iturmendi. El recuento de fitoplancton fue realizado por la Dra. Cecilia Fernández (IADO); la caracterización de microbiota y determinación de levaduras, así como las cinéticas y parámetros asociados, se llevaron a cabo en el marco de la tesina de la Lic. María Clara Tarifa, bajo la dirección de las Dras. Diaz y Brugnoli (Tarifa, 2011). Los parámetros más relevantes del modelo fueron determinados en un trabajo previo (Iturmendi *et al.*, 2012) a partir de los datos recolectados

El objetivo de las estrategias del manejo es la minimización de la diferencia entre el valor deseado de la demanda bioquímica de oxígeno y el valor actual a lo largo de un horizonte

de tiempo de un año, considerando la potencia eléctrica del motor de los aireadores y la velocidad de dosificación de nutrientes como variables de control. Como resultado de la optimización dinámica se obtienen los perfiles de las variables de control a lo largo del horizonte de tiempo considerado.

7.2 Caso de Estudio

La industria nacional de jugo concentrado está integrada fundamentalmente por Pequeñas y Medianas Empresas, ubicadas principalmente en las regiones del Alto Valle de Río Negro y Neuquén y del Valle Medio del Río Negro. Allí se concentra el 80% de la red de agroindustrias elaboradoras de jugos concentrados, sidra, deshidratados, conservas, pulpas deshidratadas y licores. Como consecuencia del proceso productivo de estas agroindustrias, se generan residuos sólidos y líquidos que deben ser tratados.

Los efluentes industriales vertidos al medio ambiente provocan diferentes impactos sobre éste en función de su naturaleza. Específicamente, los efluentes de las industrias jugueras contienen propiedades fisicoquímicas y biológicas diferentes a las encontradas en los cauces de agua aledaños, tales como alto contenido de materia orgánica, bajo pH, desequilibrios de nutrientes, etc. En el caso de la empresa JUGOS SA, sus efluentes son vertidos a un tributario del Río Negro, con lo cual deben ser tratados para cumplir con la legislación ambiental local.

Para ello, la empresa posee una planta de tratamiento de efluentes de tipo biológico compuesta por tres lagunas dispuestas en serie, dos de aireación y una facultativa. Cabe aclarar que previo bombeo a las lagunas, hay una etapa de separación primaria de sólidos consistente en tamices rotativos dispuestos en serie con poros de 1,5 mm y 0,5 mm de diámetro.

En la laguna aireada aeróbica, el efluente industrial proveniente del pozo de bombeo se pone en contacto con una masa activa de microorganismos en presencia de oxígeno disuelto atmosférico. La agitación de la masa líquida, necesaria para evitar la sedimentación de los sólidos suspendidos presentes (biomasa) y la incorporación del oxígeno del aire necesario para la actividad o respiración microbiana, se logra con la instalación de equipos aireadores rápidos de eje vertical del tipo flotantes. Cada una de las lagunas de oxidación biológica primaria tiene un volumen útil de 15000 m³ y una altura de nivel líquido de 2.5 m., resultando así una permanencia hidráulica media del líquido tratado de 3 días. De esta manera, en esta laguna se remueven los compuestos orgánicos fácilmente biodegradables en su totalidad, mientras que ocurre una estabilización u oxidación parcial de las sustancias de degradación lenta.

En la laguna facultativa, a diferencia de las anteriores, el nivel de mezcla es suficiente como para mantener un régimen aeróbico en la parte superior del líquido, permitiendo, al mismo tiempo, la sedimentación de los sólidos biológicos presentes, que se depositan sobre el fondo de la unidad. Esta laguna también tiene instalados equipos aireadores flotantes de eje vertical, sin embargo, el oxígeno requerido para la actividad microbiana aeróbica es aportado principalmente por la fotosíntesis llevada a cabo por las algas presentes en dichas lagunas. La laguna aireada facultativa tiene un volumen útil de 55000 m³ y una altura de líquido útil de 3 m, resultando así una permanencia hidráulica media del líquido tratado de 11 días.

Los sólidos suspendidos sedimentados en el fondo de la laguna sufren un proceso de degradación anaeróbico y se acumulan a una velocidad relativamente lenta, a lo largo de del tiempo. En principio, cuando se produce un sensible arrastre de sólidos suspendidos en el efluente tratado, es necesario remover dicho sedimento.

El tiempo total de retención medio de las aguas residuales en el sistema de tratamiento es de 17 días. El sistema de lagunas recibe volúmenes de afluente variables de acuerdo a la época del año, como consecuencia de la estacionalidad de la materia prima con la que se trabaja, llegándose a procesar en su punto máximo alrededor de 200 000 toneladas de fruta. Fuera de la época de cosecha la empresa cuenta con intervalos de producción donde la fruta proviene de cámaras frigoríficas, y se procesan entre 200 a 2000 toneladas, aproximadamente.

La temporada alta corresponde a los meses de diciembre a marzo, mientras que la temporada baja a los meses de abril a noviembre. Sin embargo, en el mes de septiembre del año del muestreo se procesaron volúmenes de fruta mayores a los esperados en esa época del año para exportación al hemisferio norte (EEUU).

7.3 Modelo de Lagunas

El modelo tiene en cuenta balances de masa dinámicos para los principales componentes de una laguna de aireación: biomasa de los tres grupos que dominan la comunidad fitoplanctónica (cianobacterias, clorófitas y diatomeas), biomasa de las bacterias aeróbicas, biomasa de las levaduras, nitratos (NO_3), amonio (NH_4), fosfatos (PO_4), fósforo y nitrógeno orgánicos (OP y ON), oxígeno disuelto (DO) y demanda bioquímica de oxígeno (DBO). Esto da lugar a un complejo sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales y algebraicas.

En las lagunas aireadas, se consideran condiciones homogéneas en todo el volumen de las mismas, mientras que en la laguna facultativa la columna de agua se discretiza en dos capas, obteniendo así un sistema diferencial algebraico. Los balances incluyen los caudales de entrada y salida, la generación y consumo, la transferencia entre capas (en la laguna facultativa) y las variaciones de volumen. El Anexo 2 presenta una descripción

detallada del modelo (Modelo I) y una comparación con el modelo presentado en el Capítulo 4 (Modelo II).

7.4 Variables de control de Lagunas

El objetivo principal de manejo de una planta de tratamiento de aguas residuales es mantener las concentraciones de demanda bioquímica de oxígeno (DBO) en el efluente por debajo del valor máximo permitido en la regulación. Esto debe lograrse sin la liberación de un exceso de nutrientes en el receptor. La DBO es una medida de la cantidad de materia orgánica susceptible a ser oxidada por microorganismos, y es utilizada como medida de la eficiencia de la laguna de estabilización (Rodríguez Serrano, 2008). Cuanto más alta la DBO, mayor cantidad de materia orgánica existe en el cuerpo de agua. El manejo de las lagunas se realiza entonces proponiendo un modelo donde se minimiza la diferencia entre el valor deseado de DBO y el valor obtenido por simulación. Este valor deseado puede ser nulo, aunque en la práctica sería muy difícil lograr esta condición.

Se considera el suministro de oxígeno mediante los aireadores mecánicos para asegurar la cantidad necesaria de oxígeno disuelto, variable indispensable para llevar a cabo la oxidación de la materia orgánica presente en las aguas a tratar. El suministro de oxígeno por parte de los aireadores mecánicos y el viento induce el mezclado vertical del líquido de la laguna, asegurando una distribución más uniforme de DBO, oxígeno disuelto, bacterias y algas y por lo tanto un mejor grado de estabilización del agua residual. La disminución de la concentración de oxígeno disuelto en la columna de agua se debe principalmente a la respiración, a la utilización de oxígeno en el proceso de oxidación de la materia orgánica, y a la nitrificación, así como también de la demanda de oxígeno del sedimento, producto de la actividad microbiana y de reacciones redox (Estrada, 2010).

El proceso de transferencia de oxígeno puede describirse como un fenómeno que ocurre en tres etapas. Inicialmente las moléculas de gas son transferidas a la superficie del

líquido, alcanzando la condición de saturación, aquí la velocidad de transferencia es mayor y la película de gas-líquido se vuelve más fina. Luego, las moléculas de oxígeno atraviesan dicha película por difusión molecular y finalmente el oxígeno se dispersa en el líquido por difusión y convección (Yáñez, 1980). En el modelo se considera que la velocidad de transferencia es proporcional a la potencia del motor de los aireadores mecánicos e inversamente proporcional al volumen de la laguna de estabilización.

La adición de químicos es una práctica generalizada en las plantas de tratamiento de aguas residuales. El objetivo es mejorar la eficiencia del tratamiento, por ejemplo, la precipitación de fósforo, o asegurar alguna condición operativa, como bicarbonato de sodio para el control de pH. Asimismo, se puede adicionar una fuente externa de carbono a fin de balancear la deficiencia de carbono en aguas residuales, cuando este sustrato se vuelve limitante (Hreiz, Latifi, & Roche, 2015). Esto último suele ocurrir en aguas residuales municipales.

Sin embargo, el contenido de nutrientes en las aguas residuales industriales, como en la industria de la celulosa y el papel o la molienda de aceitunas para la producción de aceite (alperujo), es bajo en nitrógeno y fósforo. Esto también sucede en el afluente de la planta de tratamiento de aguas residuales de la juguera bajo estudio.

La importancia del contenido de nutrientes y su efecto en la DBO han sido estudiadas por Jefferson, Burgess, Pichon, Harkness y Judd (2001), quienes muestran la factibilidad de optimizar el tratamiento biológico de los efluentes conocidos como aguas grises mediante la adición de macro y micronutrientes, concluyendo que balancear la relación N:P incrementaba sustancialmente la velocidad de captación de oxígeno y remoción de DQO, indicando que tanto el nitrógeno como el fósforo tienen una importancia vital en la biodegradación de la materia orgánica. Sin embargo, Slade, Thorn y Dennis (2011) sugirieron que el contenido de nitrógeno no afectaba significativamente la remoción de

DBO, a partir de un estudio de la influencia de la relación DBO:N aumentando el contenido de N en aguas residuales sintetizadas en el laboratorio, con concentraciones conocidas de nutrientes en su forma inorgánica y biomasa. No obstante, los autores indican que no pueden afirmar que esto sea necesariamente cierto en aguas residuales (no sintéticas), las cuales contienen nutrientes en su forma orgánica.

Una práctica común en la planta de tratamiento de la empresa JUGOS S.A. es la dosificación de nutrientes, pero no en forma sistemática, sino que a prueba y error. Los nutrientes son fundamentales para el buen funcionamiento del tratamiento en lagunas. A medida que progresa la depuración se va produciendo una eliminación de nutrientes que puede dar lugar a que uno o varios alcancen concentraciones limitantes para el desarrollo subsiguiente de algas o bacterias. El tratamiento de aguas residuales a niveles insuficientes de nutrientes a menudo resulta en mala calidad del efluente, ya que la velocidad de absorción de carbono es superior a la velocidad de captación de los demás nutrientes, causando deficiencia de fósforo y nitrógeno en la biomasa.

Este desequilibrio solo se puede superar mediante el aumento de la concentración de nutrientes en torno a la biomasa. Entonces, para favorecer el proceso biológico, deben añadirse fósforo y nitrógeno a las aguas residuales deficiente de nutrientes (Lindblom, 2003). Como regla del pulgar para la adición de nutrientes, se busca lograr una relación DBO:N:P de 100:5:1. La determinación de esta relación depende de la relación celular entre el carbono, nitrógeno y fósforo. Amaray (2004) afirma que esa relación supone un 100% de remoción de carga orgánica, que el contenido de nitrógeno en la biomasa es del 12.3% y que el coeficiente de rendimiento es 41%. El autor propone una forma de modificar la relación bajo otras condiciones (diferentes porcentajes de remoción y coeficientes de rendimiento). Sin embargo, no han obtenido estos valores de modo algorítmico sino a través de la experimentación.

Tanto fitoplancton como bacterias utilizan los nutrientes presentes para su crecimiento. A medida que la concentración de nutrientes disminuye, la velocidad de crecimiento descende. Sin embargo, cuando uno de ellos se agota (nutriente limitante), el crecimiento se detiene. La limitación por un solo nutriente se describe a través de la ley del mínimo de Liebig (Grau, 1991), y así es como se tiene en cuenta en el presente modelo de sistemas de lagunas de estabilización.

La presente estrategia de manejo de la dosificación de nutrientes se ha implementado previamente en una planta de tratamiento biológico de la fábrica de papel de Hyltebruk, aguas residuales deficiente en nutrientes (Lindblom, 2003). Para ello, el nitrógeno se añade en forma de urea, un fertilizante común con fórmula química $(\text{NH}_2)_2\text{CO}$. La urea se disuelve lentamente cuando se diluye en agua en forma de iones amonio y dióxido de carbono. En tanto, el fósforo se añade en forma de gránulos NP. Esta sal se compone de $\text{NH}_4\text{-N}$ (14%), $\text{NO}_3\text{-N}$ (12%) y $\text{PO}_4\text{-P}$ (6%).

7.5 Formulación de un Problema de Control Óptimo

El modelo DAE formulado se describe de la siguiente forma

$$f(t, (x(t), \dot{x}(t), y(t), u(t), v) = 0 \quad (95)$$

$$h(t, (x(t), y(t), u(t), v) = 0 \quad (96)$$

$$g(t, (x(t), y(t), u(t), v) \leq 0 \quad (97)$$

$$x(t_0) = x_0 \quad (98)$$

$$x_{LB} \leq x(t) \leq x_{UB} \quad (99)$$

$$y_{LB} \leq y(t) \leq y_{UB} \quad (100)$$

$$u_{LB} \leq u(t) \leq u_{UB} \quad (101)$$

$$v_{LB} \leq v \leq v_{UB} \quad (102)$$

Donde $x(t)$ y $y(t)$ son variables de estado diferenciales y algebraicas, respectivamente; $\dot{x}(t)$ son las derivadas de $x(t)$ (i.e., $\dot{x}(t) = dx/dt$), $u(t)$ son las variables de control (grados de libertad) y v los parámetros invariantes en el tiempo (también grados de libertad). En el contexto de las lagunas de estabilización, las variables diferenciales $x(t)$ corresponden a las concentraciones de DBO, oxígeno disuelto, bacterias, algas, nutrientes, etc. Por su parte, las variables algebraicas $y(t)$ representan las funciones impulsoras del modelo, tales como precipitaciones, radiación solar, concentraciones de entrada, caudales de entrada, y también velocidades de reacción y funciones de limitación. Las variables de control $u(t)$ son la potencia de los aireadores y la dosificación de los distintos nutrientes, como se mencionó anteriormente.

El problema de manejo de lagunas es un caso de optimización dinámica, donde se busca determinar los valores de los parámetros invariantes en el tiempo v y de los perfiles de las variables de control $u(t)$ sobre todo el horizonte de tiempo $[0, t_f]$ a fin de minimizar el valor de la variable z . El horizonte de tiempo no nulo y finito se divide en K intervalos de control $[t^k, t^{k+1}]$, $k=0, \dots, K-1$ de modo que $t^0 \equiv 0$ y $t^K \equiv t_f$.

$$\min z(t_f) = \varphi(x, \dot{x}, y, u, v) \quad (103)$$

Una opción es minimizar la integral de la función $\varphi(x, \dot{x}, y, u, v)$ sobre todo el horizonte de tiempo.

$$z(t_f) = \int_0^{t_f} (C_{DBO} - C_{DBO \text{ setpoint}})^2 dt \quad (104)$$

Lo cual es equivalente a agregar la siguiente ecuación diferencial junto con su condición inicial.

$$z(0) = 0 \quad (105)$$

$$\dot{z} = (C_{DBO} - C_{DBO \text{ setpoint}})^2 \quad (106)$$

En el caso de un sistema de lagunas, la DBO corresponde a la concentración de la corriente de salida del sistema.

7.6 Resultados y Discusiones

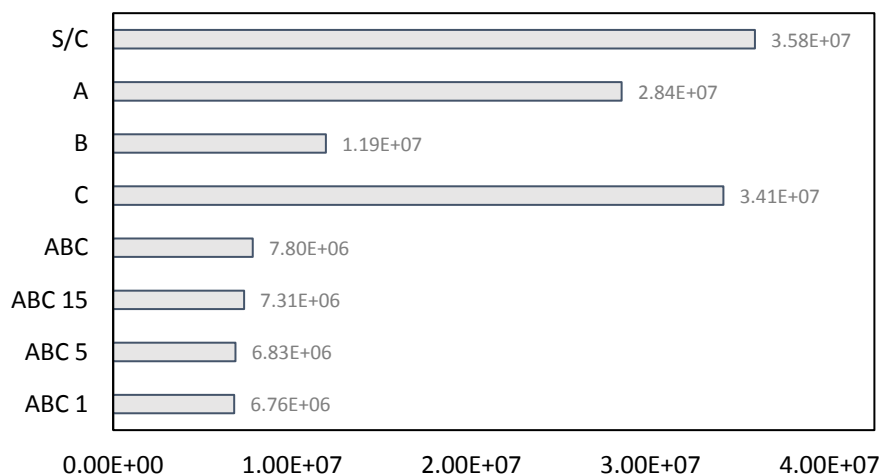
Se han aplicado distintas estrategias de control solamente al modelo dinámico de la primera laguna aireada del sistema de lagunas de estabilización a fin de minimizar la concentración de DBO en la corriente de salida y así cumplir con la reglamentación de vertido de efluentes.

En la estrategia denominada A se trata de proveer aireación a la laguna a través del uso de agitadores. La variable de control es la potencia del agitador. La estrategia B consiste en la dosificación de los gránulos de NP (nitrógeno y fósforo) y la estrategia C en la dosificación de urea. El objetivo de estas dos últimas estrategias es favorecer el crecimiento de biomasa, ya que el mismo depende simultáneamente de la concentración de nitrógeno (en forma de amonio y nitratos) y de fósforo (en forma de fosfatos).

Para la primera laguna aireada, se aplicaron las tres estrategias de forma individual (A, B y C) y también simultáneamente (ABC) considerando un intervalo de control de 30 días para un horizonte de un año. En la Figura 47 se puede observar cómo varía el valor de la función objetivo, descrita por la Ec. (104).

La estrategia individual de aireación (estrategia A) logra una reducción del 21% del valor de la función objetivo en relación a la operación sin control (caso S/C). Es decir, que a diferencia de los afluentes de las plantas de tratamiento biológicos estudiados en la bibliografía, generalmente correspondiente a aguas residuales de uso domiciliario, en este caso se corrobora la necesidad de balancear la relación DBO:N:P que se había planteado. La estrategia individual de dosificación de urea (estrategia C) resulta la menos eficiente, ocasionando una disminución de la función objetivo del 4.75%, lo cual comprueba que la

limitación no es solamente por deficiencia de nitrógeno. Cuando la estrategia consiste en la dosificación de gránulos NP (estrategia B), se obtiene una disminución del 67% del valor de la función objetivo en los casos individuales, es decir se logra una mayor remoción de carga orgánica durante el horizonte tiempo estudiado.



Valor de la Función Objetivo

Figura 47. Valor de la función objetivo S/C: sin control, A: aireación, B: dosificación de gránulos NP, C: dosificación de urea y ABC: las tres estrategias de control en simultáneo para un intervalo de control de 30 días. ABC 15, ABC 5 y ABC 1 representan las tres estrategias en simultáneo para un intervalo de control de 15, 5 y 1, días respectivamente (únicamente aplicadas a la primera laguna aireada del sistema).

Luego, se aplicaron las tres estrategias simultáneamente (estrategia ABC) logrando una mayor remoción de carga orgánica. En la Figura 47, se puede observar una disminución del valor de la función objetivo del 78% en relación al caso S/C. Además, se analizó el impacto en la reducción de los tiempos de los intervalos de control. El intervalo de control inicial era de 30 días, y se redujo a 15, 5 y 1 días, respectivamente. En este último caso (ABC 1) se logró reducir el valor de la función objetivo solamente un 3% más que la reducción lograda en el caso ABC correspondiente a un intervalo de control de 30 días.

A continuación, se presentan los perfiles de las variables de control y de estado correspondiente a la demanda bioquímica de oxígeno de salida (DBO) y de entrada

(DBO_{in}) para las estrategias previamente presentadas. El tiempo inicial corresponde al mes de marzo, parte del período de temporada alta de producción de la planta.

En primer lugar, se aplicó la estrategia individual de aireación, resultando que los aireadores actúen a su máxima potencia durante todo el horizonte de tiempo (Figura 48), aun así, no se logra cumplir con el valor máximo permitido por la legislación de 50g/m^3 de DBO para ningún instante del horizonte de tiempo.

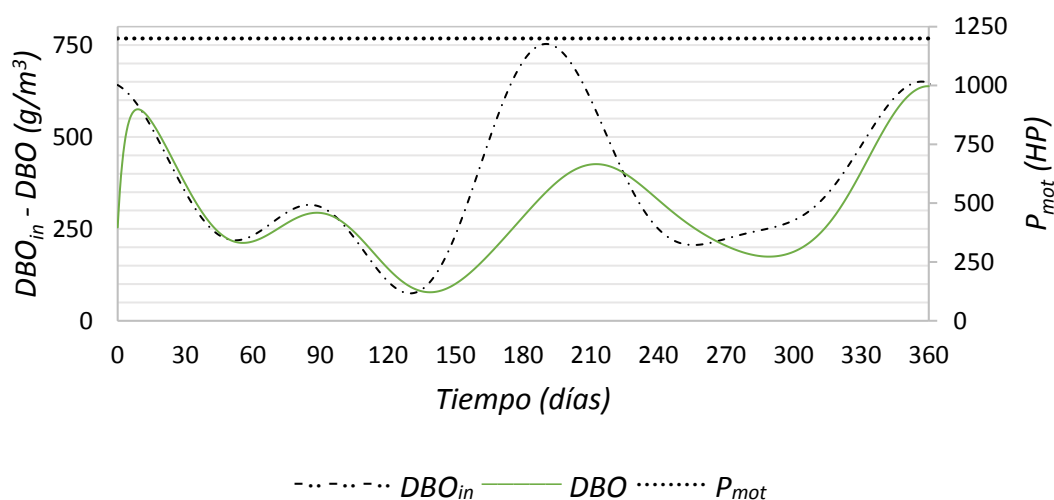


Figura 48. Perfiles de la concentración de demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO), y potencia del motor (P_{mot}) manipulando la aireación únicamente (estrategia A) con intervalos de control de 30 días.

Luego se aplicó la estrategia de dosificación de nutrientes mediante el agregado de gránulos NP, sal compuestas por amonio, nitrato y fosfato, cuya concentración se especifica en la sección anterior. Como se observa en el cuadro superior de la Figura 49, se logra disminuir significativamente la cantidad de DBO en la corriente de salida sobre gran parte del horizonte de tiempo, obteniendo valores inferiores al máximo valor permitido por la legislación a partir de la mitad del segundo intervalo de control hasta casi la totalidad del onceavo intervalo.

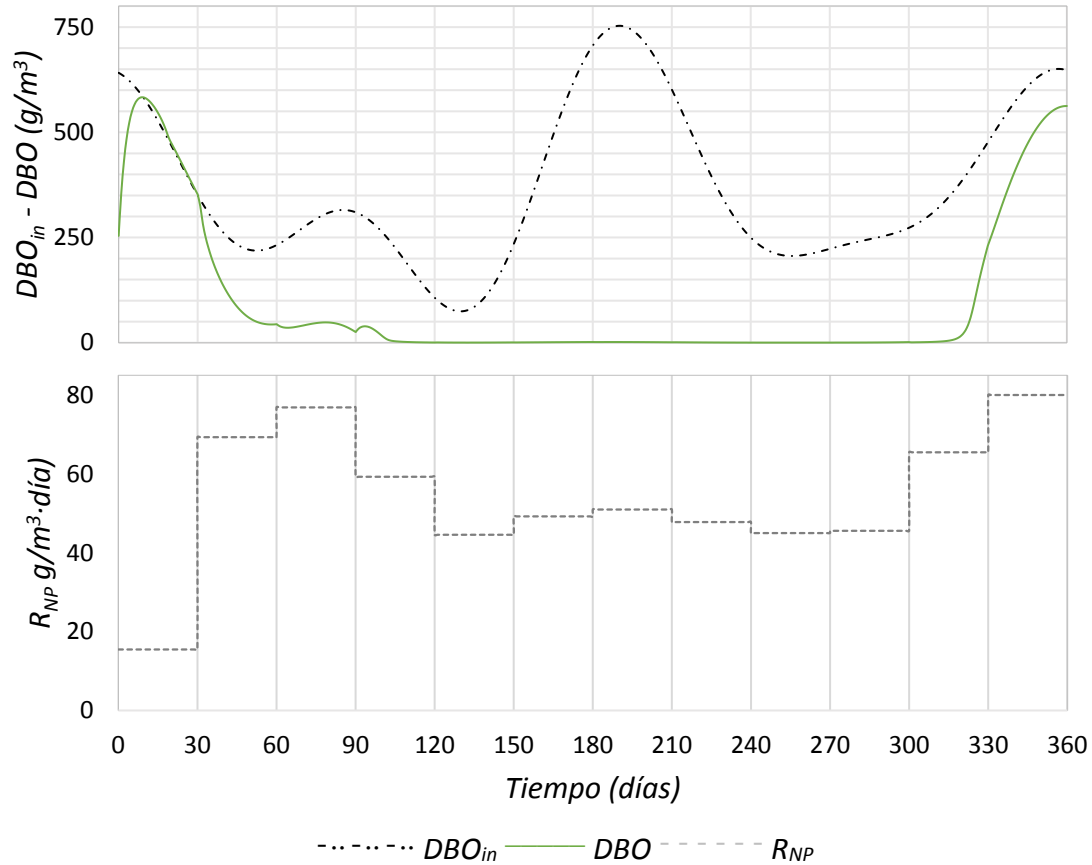


Figura 49. Control por dosificación de gránulos de NP (estrategia B) con intervalos de 30 días: Arriba: Perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO). Abajo: Perfil de velocidad de dosificación de gránulos de Nitrógeno-Fósforo.

No se presentan los resultados generados con la estrategia de control C, correspondiente a la dosificación de urea únicamente, ya que no genera una mejora en la remoción de DBO debido a que las limitaciones en los nutrientes son ocasionadas por la falta tanto de fósforo como de nitrógeno.

Posteriormente, se aplicaron las tres estrategias de forma simultánea (estrategia ABC). También se logra una importante reducción en la carga orgánica de la primera laguna, siendo superior a la estrategia B en el primer y último intervalos de control, ya que los picos de DBO en el afluente correspondientes a la temporada alta de producción de jugos logran disminuir en cierta medida, como puede apreciarse en la Figura 50. Cabe destacar que esto último ocurre gracias a la acción de los aireadores.

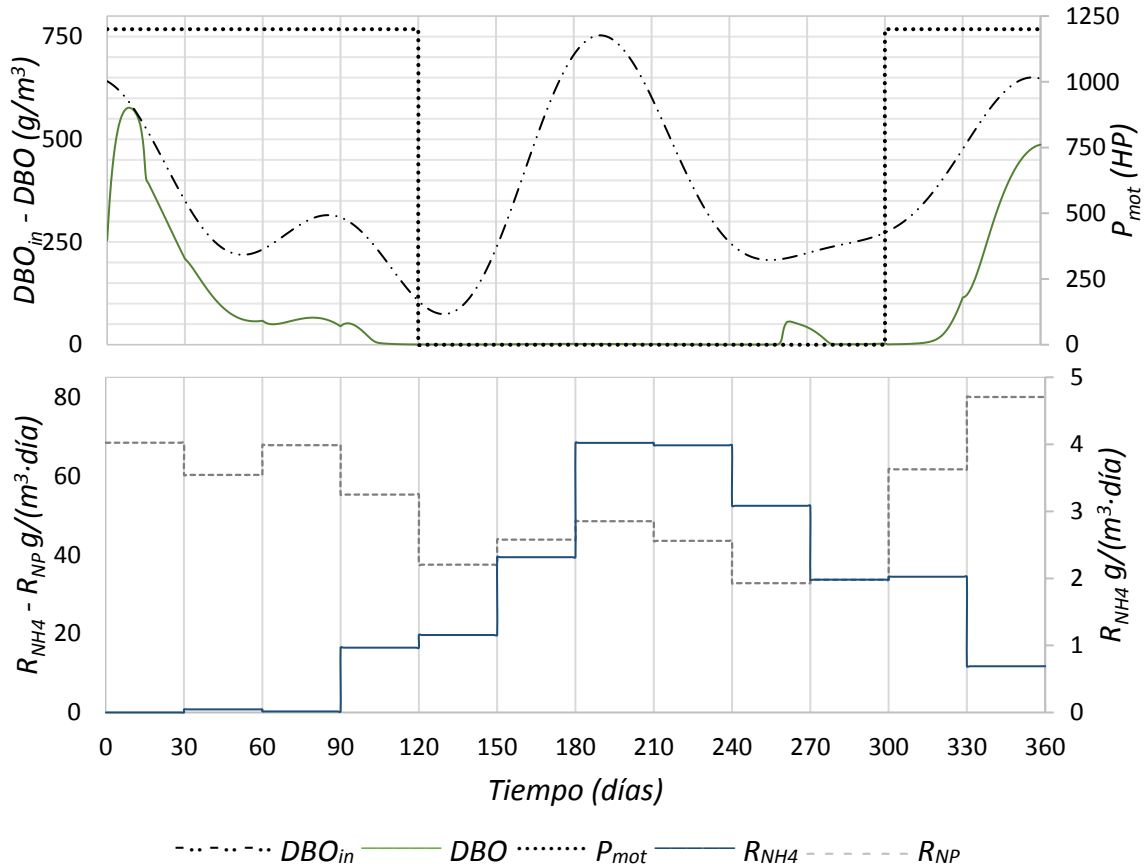
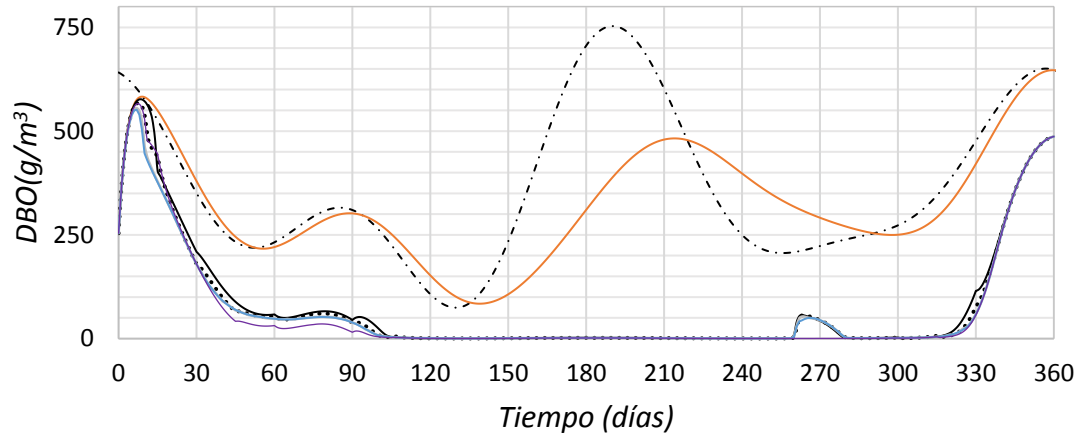


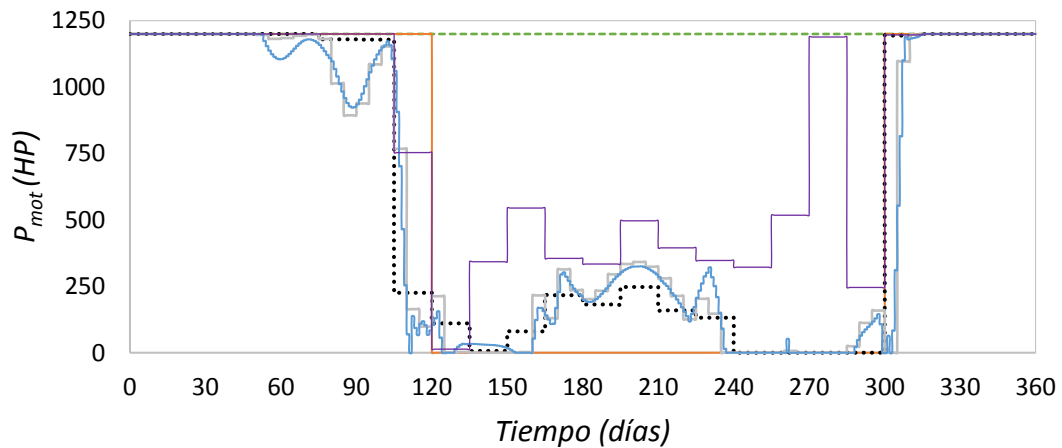
Figura 50. Aplicación de las tres estrategias de control (ABC) con intervalo de control de 30 días. Arriba: perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}) y final (DBO), y de la potencia del motor (P_{mot}). Abajo: perfil de la velocidad de dosificación de urea (R_{NH4}) y gránulos de Nitrógeno-Fósforo (R_{NP}).

A continuación, se exploraron distintos intervalos de control, es decir, el período de tiempo en que se aplica un determinado valor de la variable de control obtenido como resultado de la optimización dinámica. Cuando se reduce la longitud del intervalo de control, si bien se logra disminuir levemente el valor de la función objetivo, no presenta una influencia significativa en el valor de la concentración de salida de DBO, como se puede observar en la Figura 51. En la misma figura, también se incluyen los resultados al modificar el valor de la concentración deseada de DBO de salida a cero en la función objetivo (Ec.(104)) considerando un intervalo de control de 15 días. Esta modificación tiene asociada una leve mejora en la remoción de DBO entre los días 40 y 100 del horizonte de tiempo, pero mayores consumos energéticos por parte de los aireadores y de nutrientes durante todo el horizonte de tiempo.



----- DBO_{in} — S/C — ABC 30 ABC 15 — ABC 5 — ABC 1 — ABC 0

Figura 51. Perfil de la concentración de la demanda bioquímica de oxígeno inicial (DBO_{in}), y final en el caso sin control (S/C) y aplicando las tres estrategias de control simultáneamente para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).



----- A 30 — ABC 30 ABC 15 — ABC 5 — ABC 1 — ABC 0

Figura 52. Perfil de la potencia del motor considerando aireación únicamente (A30) y las tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).

Los perfiles de las variables de control presentados en las Figuras 52 a 54 se vieron modificados a medida que la cantidad de días del intervalo de control se reducía, logrando adaptarse mejor a las necesidades de la laguna. No obstante, esto ocasiona un incremento del tamaño del problema de optimización externo

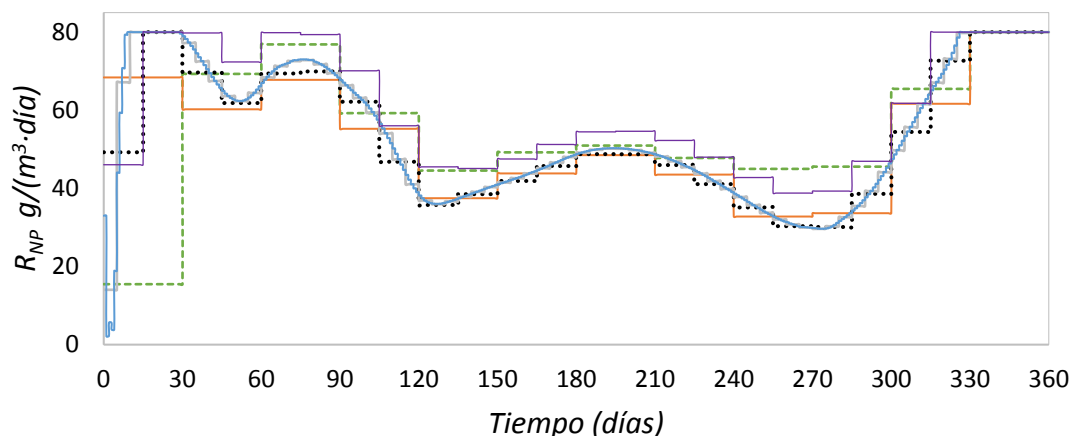


Figura 53. Perfil de dosificación de gránulos de NP considerando la dosificación únicamente (B 30) y las tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0).

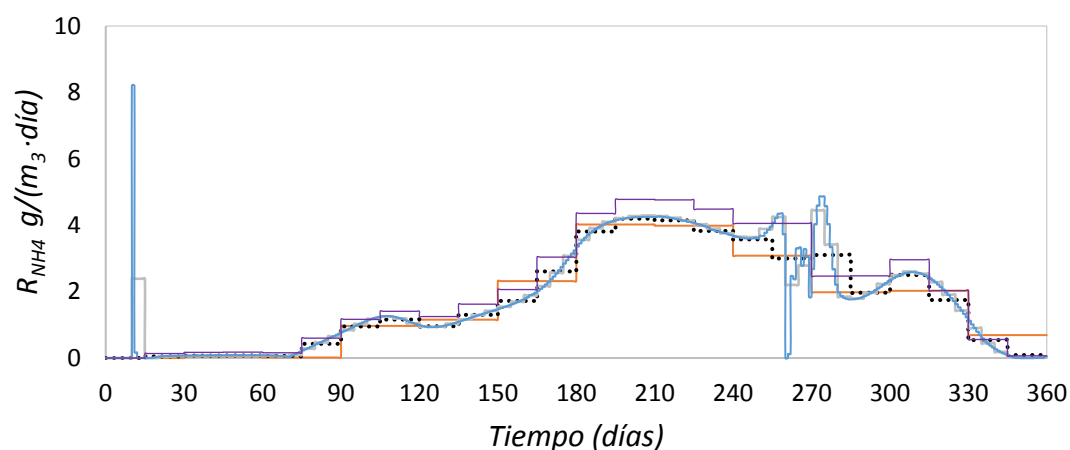


Figura 54. Perfil de dosificación urea: tres estrategias de control en simultáneo para intervalos de control de 30 días (ABC 30), 15 días (ABC 15), 5 días (ABC 5), 1 día (ABC 1) y 15 días cambiando el valor de la concentración deseada de DBO a cero en la función objetivo (ABC 0)

Los resultados muestran que disminuir el tamaño del intervalo de control en el problema formulado contribuye a la mejora en la remoción de materia orgánica de la laguna, al mismo tiempo reduciendo el consumo energético de los aireadores mecánicos y el agregado de nutrientes.

Este estudio se puede extender a todo el sistema de lagunas, incorporando la segunda laguna aireada y la facultativa (discretizada en dos capas). El tamaño del problema aumenta significativamente, y a la fecha se estudian estrategias para abordar el problema resultante. El valor deseado de DBO utilizado en la función objetivo se debe comparar con el valor de la DBO a la salida de todo el sistema de lagunas.

7.7 Conclusiones

A partir de un modelo matemático mecanístico fue posible describir los procesos que tienen lugar dentro de un sistema de lagunas de estabilización para el tratamiento secundario de aguas residuales, cuyo objetivo principal es la oxidación de la materia orgánica.

Con el fin de cumplir con la legislación vigente en la provincia de Río Negro sobre el vertido de efluentes industriales, se consideraron diferentes estrategias de control obteniendo los perfiles temporales de las variables de control a partir de la resolución de un problema de optimización dinámica del modelo, resuelto en un marco de parametrización de las variables de control. Las estrategias incluyen la aireación de la laguna, y la dosificación de urea y gránulos NP (compuesto por amonio, nitratos y fosfatos). Las mismas fueron aplicadas de forma individual y simultánea a fin de analizar cuál es la más eficiente en términos de remoción de materia orgánica. Además, se analizó la influencia de la duración del intervalo de control sobre los resultados de la optimización dinámica.

El modelo de optimización desarrollado constituye una herramienta poderosa para el manejo de las lagunas, basado en información sobre las complejas relaciones entre todas las variables del modelo biológico. Cabe destacar que la concentración de salida de DBO es menor luego de aplicar las estrategias de control en relación al caso sin control. Se determinaron los perfiles óptimos de caudales de entrada de nutrientes y potencia de los

aireadores mecánicos que minimizan la concentración de DBO en el efluente de la planta a lo largo de un horizonte de tiempo de un año. Sin embargo, no se puede afirmar que sea una solución globalmente óptima, ya que el solver (CVP_SS) no tiene la capacidad de asegurar el óptimo global.

CONCLUSIONES Y TRABAJOS FUTUROS

En la presente tesis se han realizado aportes en el estudio del análisis dinámico de sensibilidad global aplicado a modelos de sistemas de reacción biológicos diversos, como fermentadores para la producción de bioetanol y sistemas de lagunas de estabilización de aguas residuales. Los modelos fueron propuestos de modo que tuvieran una complejidad creciente, tratándose de modelos dinámicos altamente no lineales con elevado número de parámetros. La aplicación de los métodos basados en la descomposición de la varianza permite la identificación de los parámetros más influyentes en las variables de salida del modelo. Esta es información muy útil, que determina el tamaño del problema de estimación de parámetros.

También se han realizado contribuciones novedosas relacionadas con el diseño de sistemas de lagunas de estabilización, teniendo en cuenta las complejas cinéticas de reacción en el modelo del problema planteado. Asimismo, se abordó el manejo de la planta de tratamiento secundario de una empresa juguera planteando un problema de control óptimo, resuelto con el enfoque de parametrización del vector de las variables de control. Esta es una herramienta muy poderosa que asiste el proceso de toma de decisiones.

8.1 Contribuciones y Conclusiones

A continuación, se enumeran las principales contribuciones realizadas en esta tesis, junto con las conclusiones a las que se arribó. En el Capítulo 2 se presentaron las principales

técnicas matemáticas que se aplicaron a lo largo de la tesis. Se introdujeron los conceptos de simulación y optimización dinámica de procesos, haciendo hincapié en el enfoque de parametrización del vector de las variables de control. También se describieron los distintos tipos de análisis de sensibilidad global y se profundizó en los métodos basados en la descomposición de la varianza, específicamente en el método de Sobol'. Se puntualizaron las ventajas de este tipo de análisis frente al resto, a pesar de su elevado costo computacional. Además, se estudiaron diferentes estimadores de las varianzas condicionales.

En el Capítulo 3 se presentaron tres modelos de complejidad creciente para la producción de bioetanol y se llevó a cabo un análisis dinámico de sensibilidad global. Los resultados numéricos que se obtuvieron permiten captar tanto los efectos de primer orden como los efectos de interacción entre los parámetros del modelo. Los perfiles temporales de los índices de sensibilidad relacionados con cada parámetro permitieron la identificación de los parámetros más influyentes en las variables del modelo a lo largo de todo el horizonte de tiempo. Un conocimiento adecuado de la influencia de los parámetros del modelo sobre las variables de estado permite su clasificación y provee información útil para la estimación de parámetros en los biorreactores y en las redes de biorreactores.

En el Capítulo 4 se presentaron los principales procesos que tienen lugar dentro de los distintos tipos de lagunas de estabilización, con lo cual se modelaron matemáticamente dos configuraciones posibles del sistema a fin de comparar su capacidad de oxidar la materia orgánica (*aer-aer-fac* y *aner-fac-aer*). A partir de los resultados de la simulación dinámica, se concluye que las diferencias entre las distintas remociones de DQO de ambas configuraciones para este sistema no son significativas debido a que los efectos de los distintos tipos de procesos sobre las distintas fuentes de carga orgánica logran compensarse. El modelo matemático mecanístico proporciona información útil sobre las

complejas relaciones entre los microorganismos, nutrientes y concentración de materia orgánica, así como información sobre el impacto de los cambios estructurales del sistema de lagunas.

En el Capítulo 5, se aplicó un análisis dinámico de sensibilidad global al modelo de tratamiento biológico de aguas residuales presentado en el Capítulo 4 para determinar los parámetros que tienen mayor influencia sobre las varianzas de las concentraciones de los componentes, teniendo en cuenta los efectos de primer orden como los de interacción entre parámetros a lo largo de todo el tiempo de operación. El modelo matemático implementado en un entorno orientado a ecuaciones consta de 72 ecuaciones diferenciales. Las simulaciones dinámicas estocásticas se realizaron en gPROMS proponiendo subproblemas que luego se utilizan simultáneamente para el cálculo de los perfiles de los índices de primer orden, totales y de interacción, lo cual se realiza dentro del entorno de Fortran 90. Cabe destacar que, a pesar de la complejidad del modelo, no se detectaron interacciones elevadas entre los parámetros y solo a tres parámetros se les atribuye la mayor incertidumbre: el coeficiente en la función de limitación por temperatura, θ , el coeficiente de transferencia de masa entre capas de la laguna facultativa, k_m , y el coeficiente de rendimiento para la concentración de bacterias heterotróficas, Y_{hb} . El análisis provee información crucial para la formulación adecuada del problema de estimación de parámetros de un sistema de lagunas de estabilización de aguas residuales. En el Capítulo 6 se formuló y resolvió un problema de diseño de sistemas tratamiento secundario de aguas residuales mediante la construcción de una superestructura incorporando los modelos rigurosos, previamente presentados en el Capítulo 4, de los distintos tipos de lagunas de estabilización. La función objetivo utilizada en este caso fue el costo total, que se minimizó sujeto a restricciones en los valores máximos permitidos en la concentración de materia orgánica del efluente de la planta. Se han asociado

variables binarias a los distintos tipos de procesos y a las cotas de las dimensiones de las lagunas. Por lo tanto, la configuración y las dimensiones del sistema son resultados del problema de programación mixto entera no lineal (MINLP).

Los resultados obtenidos proporcionan información útil acerca de las complejas relaciones entre las variables tecnológicas, biológicas, económicas y ambientales de los procesos en la optimización del diseño de las redes de tratamiento de aguas residuales.

Posteriormente en el Capítulo 7, a partir de un modelo matemático mecanístico calibrado con datos de la planta de tratamiento secundario de una empresa juguera fue posible la implementación de estrategias de manejo a fin de cumplir con la legislación vigente en la provincia de Río Negro sobre el vertido de efluentes industriales. Se planteó un problema de optimización dinámica para obtener los perfiles temporales de las variables de control, resuelto en un marco de parametrización de las variables de control. Las estrategias incluyen la aireación de la laguna y la dosificación nutrientes. Esta última consiste en el agregado de urea y de gránulos NP (compuesto por amonio, nitratos y fosfatos). Las mismas fueron aplicadas de forma individual y simultánea para determinar cuál generaba una mayor remoción de materia orgánica. Otro aspecto que se analizó fue la influencia de la duración del intervalo de control sobre los resultados de la optimización dinámica. Se obtuvieron los perfiles de la potencia de los aireadores, y la velocidad de dosificación de urea y gránulos NP para cada caso. La aplicación de las tres estrategias en simultáneo logra la mayor reducción de carga orgánica en el efluente. Mientras que un intervalo de control de menor longitud impacta principalmente en los perfiles de las variables de control, ocasionando una reducción en la energía de la aireación y la cantidad de nutrientes utilizados. La aplicación del enfoque de control óptimo permite evaluar las estrategias de manejo de lagunas de estabilización y provee información útil para apoyar el proceso de toma de decisiones.

Finalmente, y como conclusión general a partir de los resultados obtenidos, se puede decir que las técnicas de ingeniería de sistemas de procesos son herramientas valiosas para el modelado, análisis de sensibilidad global y optimización dinámica de sistemas de biorreactores, siendo estas técnicas de fundamental importancia en el desarrollo de diversos procesos biotecnológicos utilizados en la actualidad.

8.2 Trabajos Futuros

La metodología presentada en esta tesis y los resultados obtenidos permiten avanzar hacia problemas de mayor complejidad en aspectos que incluyen tanto el modelado como consideraciones acerca de los problemas numéricos relacionados con sistemas de reacción biológicos. La extensión del modelo MINLP para el diseño de sistemas de lagunas de estabilización es parte del trabajo actual, incorporando la posibilidad de operar en paralelo y teniendo en cuenta todas las posibles interconexiones y reciclos entre las unidades.

También se propone realizar estudios relacionados con el manejo de variables de control en sistemas de lagunas de tratamiento como una extensión natural del análisis realizado para una sola laguna en el Capítulo 7. Se trata de un problema inherentemente más complejo debido al tamaño del modelo.

Otras proyecciones incluyen la incorporación de los modelos hidráulicos y el desarrollo de modelos en tres dimensiones para lograr una mejor representación de los sistemas acuáticos. Esto permitirá considerar el impacto de las variables físicas, como por ejemplo, el efecto del viento, así como tener en cuenta la falta de homogeneidad dentro del cuerpo de agua e incluir estrategias para asegurar el mezclado uniforme.

REFERENCIAS

A

- Alasino, N., Mussati, M., Scenna, N., & Aguirre, P. (2010). Wastewater Treatment Plant Removal Synthesis and Design: Combined Biological Nitrogen and Phosphorous Removal. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49, 8601-8612.
- Albernas-Carvajal, Y., Corsano, G., Kafarov, V., González Cortés, M., & González Suárez, E. (2014). Optimal design of pre-fermentation and fermentation stages applying nonlinear programming. *Energy Conversion & Management*, 87, 1195-1201.
- Amaray, B. (2004). Nutrients requirements in biological industrial wastewater treatment. *African Journal of Biotechnology*, 3(4), 236-238.

B

- Babkin, V., & Klige, R. (2003). The Earth and its physical features: The hydrosphere. En I. Shiklomanov, & J. Rodda, *World Water Resources at the Beginning of the Twenty-First Century - International Hydrology Series* (págs. 10-18). Cambridge: Cambridge University Press.
- Baklouti, M., Faure, V., Pawlowski, L., & Sciandra, A. (2006). Investigation and sensitivity analysis of mechanistic phytoplankton model implemented in a new modular numerical tool (Eco3M) dedicated to biogeochemical modelling. *Progress in Oceanography*, 71, 34-58.
- Beran, B., & Kargi, F. (2005). A dynamic mathematical model for wastewater stabilization ponds. *Ecological Modelling*, 181, 39-57.
- Biegler, L. (2010). *Nonlinear programming: Concepts, Algorithms, and Application to Chemical Processes*. Pittsburgh: Society for Industrial and Applied Mathematics.
- Brauer, F., & Kribs, C. (2016). *Dinamical Systems for Biological Modeling: An Introduction*. Boca Raton, Florida: CRC Press.
- Brenan, K., Campbell, S., & Petzold, L. (1996). *The numerical solution of initial value problem in differential-algebraic equations*. SIAM Classics Series. Elsevier Science Publishing Co.
- Brooke, A., Kendrick, D., Meeraus, A., & Raman, R. (2012). *GAMS- A User's Guide*. Washington DC.

C

- Chachuat, B., Roche, N., & Latifi, M. (2001). Dynamic optimisation of small size wastewater treatment plants including nitrification and denitrification processes. *Computers and Chemical Engineering*, 25(4-6), 585-593.
- Chen, L., Tian, Y., Cao, C., Zhang, S., & Zhang, S. (2012). Sensitivity and uncertainty analyses of an extended ASM3-SMP model describing membrane bioreactor operation. *Journal of Membrane Science*, 389, 99–109.
- Chen, M., & Wang, F. (2010). Optimal trade-off design of integrated fermentation processes for ethanol production using genetically engineered yeast. *Chemical Engineering Journal*, 158(2), 271-280.
- Copp, J. (Ed.). (2000). *The COST simulation benchmark: Description and simulator manual*. Luxemburgo: Office for Official Publications of the European Communities.
- Corsano, G., Aguirre, P., Irabien, O., & Montagna, J. (2004). Batch fermentation network model for optimal synthesis, design and operation. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 43, 4211-4219.
- Corsano, G., Iribarren, O., Montagna, J., Aguirre, P., & Suarez, E. (2006). Economic tradeoffs involved in the design of fermentation processes with environmental constraints. *Chemical Engineering Research & Design*, 84(A10), 932-942.
- Corsano, G., Vecchiotti, A., & Montagna, J. (2011). Optimal design for sustainable bioethanol supply chain considering detailed plant performance model. *Computers & Chemical Engineering*, 35, 1384-1398.
- Cortés Martínez, F., Treviño Cansino, A., Sáenz López, A., González Barrios, J., & de la Cruz Acosta, F.J. (2016). Mathematical modeling and optimization in the design of maturation pond. *Journal of Applied Research and Technology*, 14, 93-100.
- Cortés Martínez, F., Treviño Casino, A., Alcorta García, M., Kalashnikov, V., & Luévanos Rojas, R. (2014). Mathematical Analysis for the Optimization of a Design in a Facultative Pond: Indicator Organism and Organic Matter. *Mathematical Problems in Engineering*, 1-12.
- Cosenza, A., Mannina, G., Vanrolleghem, P., & Neumann, M. (2013). Global sensitivity analysis in wastewater applications: A comprehensive comparison of different methods. *Environmental Modelling & Software*, 49, 40-52.
- Cristea, S., de Prada, C., Sarabia, D., & Gutiérrez, G. (2011). Aeration control of a wastewater treatment plant using hybrid NMPC. *Computers and Chemical Engineering*, 35, 638-650.

Cukier, R., Fortuin, C., Shuler, K., Petschek, A., & Schaibly, J. (1973). Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. *Journal of Chemical Physics*, 59, 3873–3878.

D

Datta, R., Maher, M., Jones, C., & Brinker, R. (2011). Ethanol - the primary renewable liquid fuel. *Journal of Chemical Technology & Biotechnology*, 86, 473–480.

De la Cruz Soriano, R., González Suárez, E., & Pedraza Gárciga, J. (2003). Producción de Acetal a partir de Bioetanol. *Ciencia y Tecnología para el Desarrollo CYTED*.

Di Maggio, J., Diaz Ricci, J., & Diaz, M.S. (2010). Global sensitivity analysis in dynamic metabolic networks. *Computers and Chemical Engineering*, 34, 770-781.

Diaz, M.S., & Biegler, L. (2015). Dynamic Optimization in Process Systems. En M. Martín Martín, *Introduction to Software for Chemical Engineers* (págs. 541-570). Boca Raton, London, New York: CRC Press.

E

Estrada, V. (2010). *Modelamiento y optimización dinámica de procesos de eutrofización*. Bahía Blanca, Argentina: Tesis Doctoral en Biología. Universidad Nacional del Sur.

Estrada, V., & Diaz, M.S. (2010). Global sensitivity analysis in the development of first principle-based eutrophication models. *Environmental Modelling & Software*, 25, 1539-1551.

Estrada, V., Parodi, E., & Diaz, M.S. (2009). Addressing the control problem of algae growth in water reservoirs with advanced dynamic optimization approaches. *Computer and Chemical Engineering*, 33, 2063-2074.

F

Fikar, M., Chachaut, B., & Latifi, M. (2005). Optimal operation of alternating activated sludge processes. *Control Engineering Practice*, 7(13), 853-861.

Fourer, R., Gay, D., & Kernighan, B. (2004). Design Principles and New Developments in the AMPL Modeling Language. En J. Kallrath (Ed.), *Modeling Languages in Mathematical Optimization* (Vol. 88, págs. 105-135). Dordrecht, The Netherlands: Springer US, Kluwer Academic Publishers. doi:10.1007/978-1-4613-0215-5_7

Fuentes, M., Aguirre, P., & Scenna, N. (2013). Optimization of bio-hydrogen production and C-N removal in combined anaerobic-aerobic systems. *Computer Aided Chemical Engineering*, 32, 793-798.

Fuentes, M., Scenna, N., & Aguirre, P. (2012). Optimization of hybrid anaerobic-aerobic SBR-based systems. *Computer Aided Chemical Engineering*, 30, 137-141.

G

Garambois, P., Roux, H., Larnier, K., Castaings, W., & Dartus, D. (2013). Characterization of process-oriented hydrologic model behavior with temporal sensitivity analysis for flash floods in Mediterranean catchments. *Hydrology and Earth System Sciences*, 17, 2305-2322.

Gear, C. (1971). The simultaneous numerical solution of differential-algebraic equations. *IEEE Tran. Circuit Theory*, CT-18, 89-95.

Gill, P., Murray, W., & Saunders, M. (1996). *User's guide for SNOPT: A FORTRAN package for large-scale nonlinear programming*. Department of Mathematics, University of California, San Diego, CA: Technical Report SOL96-0.

Gill, P., Murray, W., & Saunders, M. (2005). SNOPT: An SQP algorithm for large-scale constrained optimization. *SIAM Review*, 47, 99-131.

Gill, P., Murray, W., Saunders, M., & Wright, M. (1986). *User's guide for NPSOL: A fortran package for nonlinear programming*. Department of Operations Research, Stanford University, Stanford, CA: Report SOL 86-2.

Grau, P. (1991). Criteria for nutrient balanced operation of activated sludge process. *Water Science & Technology*, 24(3/4), 251-258.

Gray, N. (2004). *Biology of wastewater treatment*. Ireland: World Scientific Publishing Company.

Grossmann, I., Viswanathan, J., Vecchiotti, A., Raman, R., & Kalvelagen, E. (2002). *DICOPT: A Discrete Continuous Optimization Package*. Engineering Research Design Center, Carnegie Mellon University, Pittsburgh, and GAMS Development Corporation, Washington, DC.

H

Henze, M. (Ed.). (2000). *Activated sludge models ASM1, ASM2, ASM2d and ASM3* (Vol. 9). IWA publishing.

- Hill, J., Nelson, E., Tilman, D., Poloski, S., & Tiffany, D. (2006). Environmental, economic, and energetic costs and benefits of biodiesel and bioethanol fuels. *Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America*, 30, 11206-112010.
- Ho, N., Chen, Z., & Brainard, A. (1998). Genetically Engineered Saccharomyces Yeast Capable of Effective Cofermentation of Glucose and Xylose. *Applied and Environmental Microbiology*, 64(3), 1852-1859.
- Homma, T., & Saltelli, A. (1996). Importance measures in global sensitivity analysis of nonlinear models. *Reliability Engineering & System Safety*, 52, 1-17.
- Hreiz, R., Latifi, M., & Roche, N. (2015). Optimal design and operation of activated sludge processes: State-of-the-art. *Chemical Engineering Journal*, 281, 900-920.
- Hreiz, R., Roche, N., Benyahia, B. , & Latifi, M. (2015). Multi-objective Optimization of Small-size Wastewater Treatment Plants Operation. *Computer Aided Chemical Engineering*, 37, 2495-2500.

I

- Iturmendi, F., Estrada, V., Ochoa, M., Hoch, P., & Diaz, M.S. (2012). Biological Wastewater Treatment: Dynamic Global Sensitivity Analysis and Parameter Estimation in a System of Waste Stabilization Ponds. *Computer Aided Chemical Engineering*, 30, 212-217.

J

- Jansen, M. (1999). Analysis of variance designs for model output. *Computer Physics Communications*, 117, 35-43.
- Jarvis, R., & Pantelides, C. (1992). *DASOLV- A differential-algebraic equation solver*. London, UK: Technical Report, Centre for Process Systems Engineering, Imperial College.
- Jefferson, B., Burgess, J., Pichon, A., Harkness, J., & Judd, S. (2001). Nutrient addition to enhance biological treatment of greywater. *Water Research*, 35(11), 2702-2710.
- Jezowski, J. (2010). Review of Water Network Design Methods with Literature Annotations. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 49(10), 4475-4516.

K

- Kent, E., Neumann, S., Kummer, U., & Mendes, P. (2013). What Can We Learn from Global Sensitivity Analysis of Biochemical Systems? *PLoS ONE*, 8(11), e79244, 1-13. doi:10.1371/journal.pone.0079244
- Kiparissides, A., Kucherenko, S., Mantalaris, A., & Pistikopoulos, E. (2009). Global sensitivity analysis challenges in biological systems modeling. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 48(15), 7168-7180.
- Krishnan, M., Ho, N., & Tsao, G. (1999). Fermentation kinetics of ethanol production from glucose and xylose by recombinant *Saccharomyces* 1400 (pLNH33). *Applied Biochemistry and Biotechnology*, 78, 373-388.

L

- Langergraber, G., Rousseau, D., García, J., & Mena, J. (2009). CWM1- a general model to describe biokinetic processes in subsurface flow constructed wetlands. *Water Science Technology*, 59(9), 1687-1697.
- Leksawasdi, N., Joachimsthal, E., & Rogers, P. (2001). Mathematical modeling of ethanol production from glucose/xylose mixtures by recombinant *Zymomonas mobilis*. *Biotechnology Letters*, 23, 1087-1093.
- Lindblom, E. (2003). *Dynamic modelling of nutrient deficient wastewater treatment processes*. Sweden: Master Thesis Department of Industrial Electrical Engineering and Automation, Lund University.
- Lou, J., & Biegler, L. (2011). Dynamic Optimization of Aeration Operations for a Benchmark Wastewater Treatment Plant. *IFAC Proceedings Volumes*, 44, págs. 14189-14194. Milán.

M

- Manache, G., & Melching, C. (2008). Identification of reliable regression- and correlation-based sensitivity measures for importance ranking of water-quality model parameters. *Environmental Modelling & Software*, 20, 549-562.
- Mannina, G., Cosenza, A., Randrianantoandro, M., Ancil, F., Neumann, M., & Vanrolleghem, P. (2014). Global sensitivity analysis in environmental water quality modelling: Where do we stand? *Proceedings 7th International Congress on Environmental Modelling and Software*, 619. San Diego.
- Mara, D. (2003). *Domestic Wastewater Treatment in Developing Countries*. UK: Earthscan.

- Massmann, C., & Holzmann, H. (2012). Analysis of the behavior of a rainfall–runoff model using three global sensitivity analysis methods evaluated at different temporal scales. *Journal of Hydrology*, 475, 97-110.
- Medri, W., & Medri, V. (2002). A Mathematical Model for the Removal of Organic Mater in Stabilization Ponds. *Brazilian Archives of Biology and Technology*, 45(1), 1-7.
- Medri, W., Costa, R., Medri, V., & Belli Filho, P. (2007). Stabilization Pond Systems: Cost Estimation for the Treatment of Piggery Waste. *Transactions of the American Society of Agricultural and Biological Engineers*, 50(4), 1409-1414.
- Morales-Rodriguez , R., Meyer, A., Gernaey, K., & Sin, G. (2011). Dynamic model-based evaluation of processes configuration for integrated operation of hydrolysis and co-fermentation for bioethanol production from lignocellulose. *Bioresource Technology*, 102, 1174-1184.
- Morales-Rodriguez, R., Gernaey, K., Meyer, A., & Sin, G. (2011). A mathematical model for simultaneous saccharification and co-fermentation (SSCF) of C6 and C5 sugars. *Chinese Journal of Chemical Engineering*, 19(2), 185-191.
- Moreno, M., Andersen, F., & Diaz, M.S. (2013). Dynamic modeling and parameter estimation for unit operations in lignocellulosic bioethanol production. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 52, 4146-4160.
- Morris, M. (1991). Factorial sampling plans for preliminary computational experiments. *Technometrics*, 33, 161-174.
- Muhaimin Samsudin, M., & Mat Don, M. (2015). Assessment of bioethanol yield by *S. cerevisiae* grown on oil palm residues: Monte Carlo simulation and sensitivity analysis. *Bioresource Technology*, 175, 417-423.

N

- Näf, U. (1994). Stochastic Simulation using gPROMS. *Computers & Chemical Engineering*, 18(1), S743-S747.
- Nakamura, Y., Sawada, T., & Inoue, E. (2011). Mathematical model for ethanol production from mixed sugars by *Pichia stipitis*. *Journal of Chemical Technology and Biotechnology*, 76, 586-592.
- Nezungai, C., & Majozi, T. (2015). Superstructure Optimisation of a Water Minimisation Network with an Embedded Multi-Contaminant Electrodialysis Model. *Computer Aided Chemical Engineering*(37), 2591-2602.
- Nguyen, D., Latifi, M., Lesage, F., & Mulholland, M. (2013). Dynamic simulation and optimization of wastewater treatment plants. *International Conference on Process Control (PC)*, June 18-21., (págs. 407-414). Štrbské Pleso, Slovakia.

Nielsen, J., Villadsen, J., & Lindén, G. (2003). *Bioreaction engineering principles*. New York: Kluwer Academic/Plenum Publisher.

O

Ochoa, M.P., & Hoch, P. (2011). Global Sensitivity analysis in bioreactor networks. *Computer Aided Chemical Engineering*, 29, 1436-1440.

Ochoa, M.P., Estrada, V. , Di Maggio, J., & Hoch, P. (2016). Dynamic global sensitivity analysis in bioreactor networks for bioethanol production. *Bioresource Technology*, 200, 666-679.

Ochoa, M. P., Estrada, V., Hoch, P. M., (2016a) Wastewater stabilization pond system: Parametric and dynamic global sensitivity analysis. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 55(44): 11403-11416.

Ochoa, M.P., Estrada, V., & Hoch, P. (2016b). MINLP Wastewater Stabilisation Ponds Synthesis using Rigorous Models under Different Scenarios. *Computer Aided Chemical Engineering*, 38(B), 2103-2108.

P

Pastres, R., & Ciavatta, S. (2005). A comparison between the uncertainties in model parameters and in forcing functions: its application to a 3D water-quality model. *Environmental Modelling & Software*, 20, 981–989.

Petzold, L. (1982). A description of DASSL: A differential/algebraic system solver. *Proc. 10th IMACS World Congress*. Montreal.

Petzold, L. (1988). Differential/algebraic equations are not ODEs. *SIAM J. Sci. Statist. Compt.*, 9, 213-231.

Pontryagin, L., Boltyanskii, V., Gamkrelidze, R., & Mishechenko, E. (1962). *The Mathematical Theory of Optimal Processes*. New York: Interscience Publishers.

PSEnterprise Ltd. (2014). *gPROMS Model Developer Guide*. London: Process Systems Enterprise Ltd.

Q

Qiao, J., & Zhang, W. (2016). Dynamic multi-objective optimization control for wastewater treatment process. *Neural Computing and Applications*, 1-11. doi:10.1007/s00521-016-2642-8

R

- Ramalho, R. (1990). *Tratamiento de Aguas Residuales*. Barcelona, Bogotá, Buenos Aires, Caracas, México: Reverte.
- Ramos, J., Valdivia, M., García-Lorente, F., & Segura, A. (2016). Benefits and perspectives on the use of biofuels. *Microbial Biotechnology*, 9, 436-440.
- Rodríguez Serrano, J. (2008). *Tratamiento de Aguas Residuales en Pequeñas Comunidades*. Hermosillo, Sonora, México: Universidad de Sonora. División de Ingeniería.
- Romaní, A., Pereira, F., Johansson, B., & Domingues, L. (2015). Metabolic engineering of *Saccharomyces cerevisiae* ethanol strains PE-2 and CAT-1 for efficient lignocellulosic fermentation. *Bioresource Technology*, 179, 150-158.
- Román-Martínez, A., Lanuza-Pérez, P., & Cepeda-Rodríguez, M. (2014). Global Sensitivity Analysis for Control of Biological Wastewater Treatment. *Computer Aided Process Engineering*, 33, 709-714.

S

- Sah, L., Rousseau, D., & Hooijmans, C. (2012). Numerical Modelling of Waste Stabilization Ponds: Where Do We Stand? *Water, Air, & Soil Pollution*, 223, 3155-3171.
- Sah, L., Rousseau, D., Hooijmans, C., & Lens, P. (2011). 3D model for a secondary facultative pond. *Ecological Modelling*, 222(9), 1592-1603.
- Saltelli, A., & Sobol', I. (1995). About the use of rank transformation in sensitivity analysis of model output. *Reliability Engineering and System Safety*, 50, 225-239.
- Saltelli, A., & Tarantola, S. (2002). On the relative importance of input factors in mathematical models: safety assessment for nuclear waste disposal. *Journal of the American Statistical Association*, 97, 702-709.
- Saltelli, A., Annoni, P., Azzini, I., Campolongo, F., Ratto, M., & Tarantola, S. (2010). Variance based sensitivity analysis of model output. Design and estimator for the total sensitivity index. *Computer Physics Communication*, 181, 259-270.
- Saltelli, A., Ratto, M., Andres, T., Campolongo, F., Cariboni, J., Gatelli, D., Saisana, M., Tarantola, S. (2008). *Global Sensitivity Analysis. The Primer*. John Wiley & Sons, Ltd.

- Saltelli, A., Tarantola, S., Campolongo, F., & Ratto, M. (2004). *Sensitivity Analysis in Practice. A Guide to Assessing Scientific Models in Probability and Statistics Series*. John Wiley & Sons Publishers.
- Savvopoulos, S., Misener, R., Panoskaltsis, N., Pistikopoulos, E., & Mantalaris, A. (2015). Global Sensitivity Analysis for a Model of B-Cell Chronic Lymphocytic Leukemia Disease Trajectories. *Computer Aided Chemical Engineering*, 37, 185-190.
- Schaibly, J., & Shuler, K. (1973). Study of the sensitivity of coupled reaction systems to uncertainties in rate coefficients. II Applications. *The Journal of Chemical Physics*, 59(8), 3879-3888. Obtenido de <http://dx.doi.org/10.1063/1.1680572>
- Sharma, S., & Rangaiah, G. (2013). Improved Constraint Handling Technique for Multi-Objective Optimization with Application to Two Fermentation Processes. En G. Rangaiah, & A. Bonilla-Petriciolet, *Multi-Objective Optimization in Chemical Engineering: Developments and Applications* (págs. 129-156). Oxford, UK: John Wiley & Sons, Ltd. doi:10.1002/9781118341704.ch5
- Sin, G., Gernaey, K., Neumann, M., van Loodsrecht, M., & Gujer, W. (2011). Global sensitivity analysis in wastewater treatment plant model applications: Prioritizing sources of uncertainty. *Water Research*, 45, 639-651.
- Slade, A., Thorn, G., & Dennis, M. (2011). The relationship between BOD:N ration and wastewater treatability in nitrogen-fixing wastewater treatment systems. *Water Science & Technology*, 63(4), 627-623.
- Sobol', I. (1990). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Matematicheskoe Modelirovanie*, 2, 112-118.
- Sobol', I. (1993). Sensitivity estimates for nonlinear mathematical models. *Mathematical Modelling and Computational Experiment*, 1, 407-414.
- Sobol', I. (2001). Global sensitivity indices for nonlinear mathematical models and their Monte Carlo estimates. *Mathematics and Computers in Simulation*, 55, 271-280.
- Sobol', I., & Shukhman, B. (2007). On global sensitivity indices: Monte Carlo estimates affected by random errors. *Monte Carlo Methods and Applications*, 13(1), 89-97.
- Song, X., Zhang, J., Zhan, C., Xuan, Y., Ye, M., & Xu, C. (2015). Global sensitivity analysis in hydrological modeling: Review of concepts, methods, theoretical framework and applications. *Journal of Hydrology*, 523, 739-757.
- Spellman, F., & Drinan, J. (2014). *Wastewater Stabilization Ponds*. Boca Raton, London, New York: CRC Press.

T

- Tang, Z., Zhenzhou, L., Zhiwen, L., & Ningcong, X. (2015). Uncertainty analysis and global sensitivity analysis of techno-economic assessments for biodiesel production. *Bioresource Technology*, 175, 502-508.
- Tarifa, M. (2011). *Modelado cinético y caracterización de la microbiota en lagunas de tratamiento biológico*. Bahía Blanca, Argentina: Tesina en Biología, Universidad Nacional del Sur.
- Todri, E., Amenaghawon, A., Jimenez del Val, I., Leak, D., Kontoravdi, C., Kucherenko, S., & Shah, N. (2014). Global sensitivity analysis and meta-modeling of an ethanol production process. *Chemical Engineering Science*, 114-127.
- Tolsma, J., & Barton, P. (2000). DAEPACK: An open modeling environment for legacy models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 39, 1826-1839.

U

- UNEP. (2002). *Freshwater Global Overview*.
- United Nations. (2016). *Framework Convention on Climate Change*. Obtenido de FCCC/CP/2015/10: <http://unfccc.int/re-source/docs>
- USDA. (2016). *Argentina - Biofuels Annual*. Buenos Aires.
- USEPA. (2011). *Principles of Design and Operations of Wastewater Treatment Pond Systems for Plant Operators, Engineers, and Managers*. Cincinnati, Ohio: US Environmental Protection Agency.

V

- von Sperling, M. (2007). *Biological Wastewater Treatment Series. Volume Three: Wastewater Stabilization Ponds*. London, New York: IWA Publishing.

W

- Wächter, A., & Biegler, L. (2006). On the implementation of an interior-point filter line-search algorithm for large-scale nonlinear programming. *Mathematical Programming*, 106(1), 25–57. doi:10.1007/s10107-004-0559-y

Y

Yáñez, F. (1980). *Transferencia de Oxígeno y Aireación*. Lima, Perú: Centro Panamericano de Ingeniería Sanitaria y Ciencias del Ambiente (CEPIS).

Yang, L., Salcedo-Diaz, R., & Grossmann, I. (2014). Water Network Optimization with Wastewater Regeneration Models. *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 53(45), 17680–17695.

Z

Zaldivar, J., Nielsen, J., & Olsson, L. (2001). Fuel ethanol production from lignocellulose: a challenge for metabolic engineering and process integration. *Applied microbiology and biotechnology*, 56, 17-34.

GLOSARIO

1G: Primera Generación de Combustibles

2G: Segunda Generación de Combustibles

AMPL: Un lenguaje para programación matemática (*A Mathematical Programming Language*)

ANOVA: Análisis de la Varianza (*ANalysis Of VAriance*)

ASG: Análisis de Sensibilidad Global (*GSA: Global Sensitivity Analysis*)

ASM: Modelo de barros activados (*Activated Sludge Model*)

BDF: Fórmulas de diferenciación hacia atrás (*Backward Differentiation Formulas*)

BMS1: Modelo de Referencia nº 1 (*Benchmark Simulation Model 1*)

CONOPT: Código para resolver problemas de optimización dinámica no lineal ralos de gran tamaño basado en el método de gradiente reducido generalizado (*A Generalized Reduced Gradient Code for Large Sparse Dynamic Nonlinear Optimization Problems*)

CPLEX: Método de simplex implementado en el lenguaje de programación C.

CVP: Parametrización del Vector de las variables Control (*Control Vector Parametrization*)

CVP_MS: Método de múltiples disparos (*Control Vector Parametrization-Multi-Shooting*)

CVP_SS: Método de único disparo (*Control Vector Parametrization-Single Shooting*)

DAE: Ecuaciones Diferenciales-Algebraicas (*Differential Algebraic Equations*)

DAEPACK: Paquete para resolver ecuaciones diferenciales y algebraicas (*Differential-Algebraic Equation PACKage*)

DASOLV: Algoritmo de resolución de ecuaciones diferenciales y algebraicas (*Differential Algebraic-equation SOLver*)

DASSL: Algoritmo de resolución de sistemas de ecuaciones diferenciales y algebraicas (*Differential/Algebraic System SoLver*)

DBO: Demanda Bioquímica de Oxígeno (*BOD: Biochemical Oxygen Demand*)

DGSM: Medidas de Sensibilidad Global basadas en Derivadas (*Derivative based Global Sensitivity Measures*)

DICOPT: Optimizador de sistemas discretos y continuos (*DIcrete and Continuous OPTimizer*)

DQO: Demanda Química de Oxígeno (*COD: Chemical Oxygen Demand*)

Extended-FAST: Test de sensibilidad de amplitud extendida de Fourier (*Extended Fourier Amplitude Sensitivity Testing*)

GAMS: Sistema de Modelado Algebraico Generalizado (*General Algebraic Modeling System*)

gPROMS: Sistema de Modelado de Procesos Generalizado (*generalized Process Modelling System*)

GSM: Métodos de exploración global (*Global Screening Methods*)

HDMR: Representación de Modelos de Alta Dimensionalidad (*High-Dimensional Model Representation*)

INTI: Instituto Nacional de Tecnología Industrial

IPOPT: Optimizador de Punto Interior (*Interior Point OPTimizer*)

MATLAB: Laboratorio de Matrices (*Matrix Laboratory*)

MC: Monte Carlo

MINLP: Programación Mixto Entera No Lineal (*Mixed-integer NonLinear Programming*)

N: Nitrógeno

NLP: Programación No Lineal (*NonLinear Programming*)

NPSOL: Laboratorio de Optimización de Sistemas de Programación No Lineal (*Nonlinear Programming Systems Optimization Laboratory*)

OAT: variación de factores uno en uno (*one-factor-at-a-time*)

ODE: Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (*Ordinary Differential Equation*)

P: Fósforo

PDAE: Ecuaciones Diferenciales a derivadas Parciales y Algebraicas (*Partial Differential Algebraic Equation*)

SA: Análisis de Sensibilidad (*Sensitivity Analysis*)

SNOPT: Optimizador de Sistemas Ralos No Lineales (*Sparse Nonlinear OPTimizer*)

SQP: Programación Cuadrática Sucesiva (*Sequential Quadratic Programming*)

SRC: coeficiente de regresión estandarizado (*Standardized Regression Coefficient*)

UNEP: Programa de las Naciones Unidas para el Medio Ambiente (*United Nations Environment Program*)

USEPA: Agencia de protección ambiental de Estados Unidos (*United States Environmental Protection Agency*)

Variables y Símbolos

V Varianza incondicional

E Valor Esperado

S_i Índice de sensibilidad global de primer orden

S_i^{TOT} Índice de sensibilidad global total

$S_{i,int}$ Índice de sensibilidad global de interacción

C_{alg} Algas (*Algae*)

C_{amb} Bacterias acetotróficas metanogénicas (*Acetotrophic methanogenic bacteria*)

C_{asrb} Bacterias acetotróficas reductoras de sulfato (*Acetotrophic sulphate reducing bacteria*)

C_{ab} Bacterias autotróficas (*Autotrophic nitrifying bacteria*)

C_{Ecoli} , Escherichia coli.

C_{fb} Bacterias fermentadoras (*Fermenting bacteria*)

C_{hb} Bacterias heterotróficas (*Heterotrophic bacteria*)

C_{DQO} Demanda Química de Oxígeno

C_{SA} Productos de la fermentación (*Fermentation Products*)

C_{SF} Sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación (*Fermentable, readily biodegradable soluble COD*)

C_{SI} Materia orgánica soluble inerte (*Inert Soluble COD*)

C_{XI} Materia orgánica particulada inerte (*Inert particulate COD*)

C_{XS} Sustrato particulado lentamente biodegradable (*Slowly biodegradable particulate COD*)

C_{N2} Nitrógeno gaseoso

C_{NH4} Nitrógeno Amoniacal (*Ammonium and ammonia nitrogen*)

C_{NO3} Nitrato (*Nitrate and nitrite nitrogen*)

C_{O2} Oxígeno disuelto (*Dissolved oxygen*)

C_{SO4} Azufre en forma de Sulfato (*Sulphate sulphur*)

ANEXO 1 - ÍNDICES DE SENSIBILIDAD GLOBAL PARA EL MODELO DINÁMICO DE UN SISTEMA DE LAGUNAS DE ESTABILIZACIÓN

Tabla A.1.1. Valores máximos (S^{\max}), mínimos (S^{\min}) y promediados en el tiempo (\bar{S}) de los índices de sensibilidad global de primer orden para el modelo de lagunas de estabilización. LA1: 1^{ra} Laguna Aeróbica, LA2: 2^{da} Laguna Aeróbica, CSLF: Capa Superior Laguna Facultativa, CILF: Capa Inferior Laguna Facultativa.

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{dstb}	b_{umb}	i_{nvalg}	b_{hb}	i_{nbn}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{DGO}	LA1	S^{\max}	0.97			0.01								0.01				0.01				
		S^{\min}	0.89																			
		\bar{S}	0.95																			
	LA2	S^{\max}	0.99															0.01				
		S^{\min}	0.97																			
		\bar{S}	0.97																			
	CSLF	S^{\max}	0.99															0.01				
		S^{\min}	0.97																			
		\bar{S}	0.97																			
	CILF	S^{\max}	0.99											0.02								
		S^{\min}	0.96																			
		\bar{S}	0.97																			

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K^{NH4hb}	K^{NH4ab}	b_{ab}	b_{β}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdlg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dlg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{SA}	LA1	S^{max}	0.96		0.25	0.07	0.02	0.03					0.01	0.01		0.02	0.02	0.03	0.02	0.01			
		S^{min}	0.36																				
		\bar{S}	0.71		0.07	0.02												0.01					
	LA2	S^{max}	0.98		0.10	0.03	0.01	0.02									0.02		0.03				
		S^{min}	0.61																				
		\bar{S}	0.84																				
	CSLF	S^{max}	0.95	0.02	0.05	0.02	0.05	0.03									0.03		0.12	0.03	0.03		0.02
		S^{min}	0.60																0.02				
		\bar{S}	0.70	0.01				0.02	0.01								0.02		0.05	0.01			0.01
	CILF	S^{max}	1.00														0.01						
		S^{min}	0.98																				
		\bar{S}	0.99																				
C_{SF}	LA1	S^{max}	0.97		0.23	0.07	0.02	0.03					0.01	0.02		0.02	0.01	0.03	0.02				
		S^{min}	0.42																				
		\bar{S}	0.74		0.06	0.02																	
	LA2	S^{max}	0.98		0.10	0.03	0.01	0.02									0.02		0.02	0.01			
		S^{min}	0.61																				
		\bar{S}	0.85		0.01																		
	CSLF	S^{max}	0.95		0.02		0.01												0.06				
		S^{min}	0.79																				
		\bar{S}	0.89																0.01				
	CILF	S^{max}	1.00	0.04											0.02			0.01					
		S^{min}	0.90																				
		\bar{S}	0.94	0.02											0.01								

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{β}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{SI}	LA1	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{\max}	0.01	1.00	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01	0.01
		S^{\min}		0.99																		
		\bar{S}		0.99																		
	CILF	S^{\max}		1.00																		
		S^{\min}		1.00																		
		\bar{S}		0.99																		
C_{N2}	LA1	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{\max}	0.83	0.05			0.01												0.53	0.03		
		S^{\min}	0.37																0.06			
		\bar{S}	0.56	0.03			0.01												0.35	0.02		
	CILF	S^{\max}	0.83				0.02							0.02					0.76	0.02		
		S^{\min}	0.13																0.06			
		\bar{S}	0.43				0.01												0.50	0.02		

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K^{NH4hb}	K^{NH4ab}	b_{ab}	b_{β}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsalg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{NH4}	LA1	S^{max}	0.91		0.05	0.02									0.01	0.03		0.05	0.02				
		S^{min}	0.77																				
		\bar{S}	0.82		0.02	0.01												0.02					
	LA2	S^{max}	0.98		0.04								0.01		0.07	0.03					0.01		
		S^{min}	0.70																				
		\bar{S}	0.92												0.01	0.01							
	CSLF	S^{max}	0.98					0.01									0.05				0.01		
		S^{min}	0.77																				
		\bar{S}	0.92														0.02						
	CILF	S^{max}	0.85	0.14	0.13	0.12							0.03		0.07								
		S^{min}	0.71		0.01	0.03									0.04								
		\bar{S}	0.79	0.07	0.03	0.04									0.06								
C_{NO3}	LA1	S^{max}	0.97		0.06	0.02							0.02					0.02		0.01		0.02	
		S^{min}	0.89																				
		\bar{S}	0.95		0.01																		
	LA2	S^{max}	0.99										0.01								0.01		
		S^{min}	0.97																				
		\bar{S}	0.98																				
	CSLF	S^{max}	0.99										0.01								0.01		
		S^{min}	0.97																				
		\bar{S}	0.98																				
	CILF	S^{max}	0.98	0.03									0.03						0.20	0.01	0.01		0.01
		S^{min}	0.47																				
		\bar{S}	0.95																0.01				

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	$b_{\beta b}$	b_{dstb}	b_{amb}	i_{nxdlg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dlg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C _{O2}	LA1	S ^{max}	0.98		0.02								0.01		0.01	0.02		0.01				
		S ^{min}	0.92																			
		S̄	0.94																			
	LA2	S ^{max}	0.99		0.01												0.06					
		S ^{min}	0.93																			
		S̄	0.97																			
	CSLF	S ^{max}	0.98														0.07					
		S ^{min}	0.94																			
		S̄	0.96														0.02					
	CILF	S ^{max}	0.97	0.04													0.06					
		S ^{min}	0.91																			
		S̄	0.94																			
C _{SO4}	LA1	S ^{max}																				
		S ^{min}																				
		S̄																				
	LA2	S ^{max}																				
		S ^{min}																				
		S̄																				
	CSLF	S ^{max}		1.00																		
		S ^{min}		1.00																		
		S̄		0.99																		
	CILF	S ^{max}		1.00																		
		S ^{min}		1.00																		
		S̄		0.99																		

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	$b_{\beta b}$	b_{dstb}	b_{umb}	i_{nxdlg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dlg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{alg}	LA1	S^{max}	0.97										0.02		0.02		0.02	0.01					
		S^{min}	0.91																				
		\bar{S}	0.94														0.01						
	LA2	S^{max}	0.99		0.05								0.02					0.02					
		S^{min}	0.89																				
		\bar{S}	0.94		0.01																		
	CSLF	S^{max}	0.99		0.03								0.03					0.02					
		S^{min}	0.92																				
		\bar{S}	0.95																				
	CILF	S^{max}	0.97	0.06	0.01									0.02				0.07					
		S^{min}	0.82															0.02					
		\bar{S}	0.87	0.04										0.01				0.03					
C_{amb}	LA1	S^{max}	0.98																				
		S^{min}	0.98																				
		\bar{S}	0.98																				
	LA2	S^{max}	0.98																				
		S^{min}	0.98																				
		\bar{S}	0.98																				
	CSLF	S^{max}	0.98																				
		S^{min}	0.98																				
		\bar{S}	0.98																				
	CILF	S^{max}	0.98																				
		S^{min}	0.97																				
		\bar{S}	0.97																				

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{β}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{asrb}	LA1	S^{\max}	0.98								0.04											
		S^{\min}	0.98								0.02											
		\bar{S}	0.98								0.03											
	LA2	S^{\max}	0.98								0.04											
		S^{\min}	0.98								0.02											
		\bar{S}	0.98								0.03											
	CSLF	S^{\max}	0.98								0.04											
		S^{\min}	0.98								0.02											
		\bar{S}	0.98								0.03											
	CILF	S^{\max}	0.98								0.04											
		S^{\min}	0.98								0.02											
		\bar{S}	0.98								0.03											
C_{ab}	LA1	S^{\max}	0.89		0.11	0.05		0.04	0.04					0.01	0.02	0.01		0.04	0.04	0.10		0.05
		S^{\min}	0.25																	0.02		0.01
		\bar{S}	0.48			0.03		0.03	0.01						0.01				0.03	0.08		0.04
	LA2	S^{\max}	0.97		0.07			0.02	0.03											0.03		0.01
		S^{\min}	0.83																			
		\bar{S}	0.87		0.04			0.01	0.01											0.01		
	CSLF	S^{\max}	0.97		0.02			0.02	0.01							0.01				0.03		0.01
		S^{\min}	0.92																			
		\bar{S}	0.95		0.01																	
	CILF	S^{\max}	0.98						0.01													
		S^{\min}	0.97																			
		\bar{S}	0.97																			

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{Ecoli}	LA1	S^{max}	1.00																			
		S^{min}	1.00																			
		\bar{S}	0.99																			
		S^{max}	1.00																			
		S^{min}	1.00																			
		\bar{S}	0.99																			
		S^{max}	1.00																			
		S^{min}	1.00																			
		\bar{S}	0.99																			
	CILF	S^{max}	0.97	0.74																		
		S^{min}	0.27	0.02																		
		\bar{S}	0.89	0.09																		
C_{fb}	LA1	S^{max}	0.99							0.01												
		S^{min}	0.98																			
		\bar{S}	0.98																			
	LA2	S^{max}	0.99							0.01												
		S^{min}	0.98																			
		\bar{S}	0.98																			
	CSLF	S^{max}	0.99							0.01												
		S^{min}	0.98																			
		\bar{S}	0.98																			
	CILF	S^{max}	0.98							0.03												
		S^{min}	0.94																			
		\bar{S}	0.97							0.01												

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	$b_{\beta b}$	b_{dstb}	b_{umb}	i_{nxdlg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dlg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{hb}	LA1	S^{max}	0.80		0.07	0.03								0.05		0.01		0.17	0.01	0.01			
		S^{min}	0.67																				
		\bar{S}	0.75		0.04	0.01								0.04				0.06					
	LA2	S^{max}	0.96		0.02										0.06				0.09				
		S^{min}	0.86												0.05								
		\bar{S}	0.88		0.01										0.05				0.05				
	CSLF	S^{max}	0.98												0.05								
		S^{min}	0.95												0.03								
		\bar{S}	0.96												0.04								
	CILF	S^{max}	0.98												0.05								
		S^{min}	0.97												0.03								
		\bar{S}	0.97												0.03								
C_{XI}	LA1	S^{max}	0.99											0.02									
		S^{min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97																				
	LA2	S^{max}	0.99															0.01					
		S^{min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97																				
	CSLF	S^{max}	0.99															0.01					
		S^{min}	0.97																				
		\bar{S}	0.97																				
	CILF	S^{max}	0.99	0.01											0.02								
		S^{min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97																				

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE PRIMER ORDEN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{β}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{Xs}	LA1	S^{\max}	0.99											0.02									
		S^{\min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97																				
	LA2	S^{\max}	0.99															0.01					
		S^{\min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97																				
	CSLF	S^{\max}	0.99															0.01					
		S^{\min}	0.97																				
		\bar{S}	0.97																				
	CILF	S^{\max}	0.99												0.03								
		S^{\min}	0.96																				
		\bar{S}	0.97												0.01								

Tabla A.1.2. Valores máximos (S^{\max}), mínimos (S^{\min}) y promediados en el tiempo (\bar{S}) de los índices de sensibilidad global de interacción del modelo de lagunas de estabilización. LA1: 1^{ra} Laguna Aeróbica, LA2: 2^{da} Laguna Aeróbica, CSLF: Capa Superior Laguna Facultativa, CILF: Capa Inferior Laguna Facultativa.

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nxdlg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dlg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{DQO}	LA1	S^{\max}	0.072		0.041									0.027		0.022		0.082	0.016			0.013
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.015		0.034													0.019				
	LA2	S^{\max}	0.024		0.048								0.016									
		S^{\min}																				
		\bar{S}			0.037																	
	CSLF	S^{\max}	0.031		0.042								0.017									
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.013		0.032																	
	CILF	S^{\max}	0.019	0.015	0.026																	
		S^{\min}																				
		\bar{S}		0.012	0.015																	

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdgl}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dgl}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{SA}	LA1	S^{\max}	0.267		0.041	0.037	0.033							0.022	0.013	0.014		0.052	0.015	0.040		0.023
		S^{\min}	0.045																	0.010		
		\bar{S}	0.184		0.022	0.021	0.012											0.034		0.031		0.013
		S^{\max}	0.224		0.044	0.031	0.016							0.014		0.015		0.035	0.012	0.040		0.014
		S^{\min}	0.031																	0.014		
		\bar{S}	0.127		0.033	0.012												0.018	0.011	0.027		
		S^{\max}	0.220		0.052	0.027	0.011	0.016						0.013		0.019		0.016	0.019	0.063		0.014
		S^{\min}																		0.015		
		\bar{S}	0.145		0.033	0.011		0.010						0.010					0.015	0.051		0.012
	CILF	S^{\max}	0.013																			
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
C_{SF}	LA1	S^{\max}	0.245		0.033	0.028	0.031							0.018	0.013	0.013		0.048		0.036		0.022
		S^{\min}	0.035																			
		\bar{S}	0.162		0.017	0.017												0.035		0.026		0.011
	LA2	S^{\max}	0.209		0.040	0.027	0.015							0.013		0.015		0.033	0.011	0.036		0.013
		S^{\min}	0.029																			
		\bar{S}	0.112		0.027	0.011										0.010		0.017		0.022		
	CSLF	S^{\max}	0.148		0.038	0.019										0.014			0.011	0.031		
		S^{\min}																		0.014		
		\bar{S}	0.074		0.022														0.010	0.023		
	CILF	S^{\max}	0.037	0.023										0.016		0.010						
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.023	0.011																		

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdkg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dkg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{SI}	LA1	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{max}	0.012		0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012	0.012
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
C_{N2}	LA1	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{max}	0.081	0.022										0.044				0.095				
		S^{min}												0.027				0.021				
		\bar{S}		0.010										0.038				0.034				
	CILF	S^{max}	0.031											0.048				0.097				
		S^{min}												0.027				0.027				
		\bar{S}												0.038				0.037				

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdgl}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dgl}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{NH4}	LA1	S^{max}	0.213			0.042											0.010	0.242		0.013		0.019
		S^{min}	0.039															0.022				
		\bar{S}	0.122															0.114				
	LA2	S^{max}	0.495					0.095								0.031		0.167		0.030		0.029
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.074					0.013										0.041		0.011		0.014
	CSLF	S^{max}	0.231					0.085								0.053		0.011		0.081		0.025
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.032					0.012												0.021		0.013
	CILF	S^{max}	0.027										0.014									
		S^{min}																				
		\bar{S}											0.010									
C_{NO3}	LA1	S^{max}	0.179		0.035	0.011							0.031		0.022		0.018	0.072				
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.028															0.011				
	LA2	S^{max}	0.025										0.010			0.016						
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.012																			
	CSLF	S^{max}	0.020													0.017						
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{max}	0.487	0.036										0.063		0.036		0.218		0.016		
		S^{min}		0.016																		
		\bar{S}	0.022	0.020																		

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdkg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dkg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{O_2}	LA1	S^{\max}	0.149		0.043								0.036		0.013	0.034	0.011	0.025				
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.045		0.016													0.015				
		S^{\max}	0.060		0.011								0.029			0.011						
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.022											0.011								
		S^{\max}	0.020											0.018			0.015					
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{\max}	0.016	0.049										0.011			0.017					
		S^{\min}		0.020																		
		\bar{S}	0.012	0.026																		
C_{SO_4}	LA1	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{\max}																				
		S^{\min}																				
		\bar{S}																				

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsalg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{alg}	LA1	S^{max}	0.132		0.066								0.052		0.013		0.030					
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.042		0.030																	
	LA2	S^{max}	0.054		0.012								0.071									
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.031										0.022									
	CSLF	S^{max}	0.052		0.013								0.062									
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.028										0.020									
	CILF	S^{max}	0.057	0.031									0.021				0.024					
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.034	0.019																		
C_{amb}	LA1	S^{max}	0.089									0.019										
		S^{min}	0.024									0.015										
		\bar{S}	0.041									0.017										
	LA2	S^{max}	0.089									0.019										
		S^{min}	0.024									0.015										
		\bar{S}	0.041									0.017										
	CSLF	S^{max}	0.089									0.019										
		S^{min}	0.024									0.014										
		\bar{S}	0.041									0.017										
	CILF	S^{max}	0.089									0.019										
		S^{min}	0.022									0.015										
		\bar{S}	0.040									0.017										

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdgl}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dgl}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{asrb}	LA1	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	LA2	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
C_{ab}	LA1	S^{max}	0.392		0.206	0.012		0.023	0.020				0.035		0.013		0.038	0.066				
		S^{min}	0.066		0.031													0.014				
		\bar{S}	0.279		0.164				0.016				0.024				0.016	0.034				
	LA2	S^{max}	0.115						0.030						0.011	0.016	0.011			0.013		
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.093						0.020													
	CSLF	S^{max}	0.091						0.026							0.017						
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.056						0.015													
	CILF	S^{max}	0.096						0.013													
		S^{min}	0.027																			
		\bar{S}	0.051						0.011													

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																				
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsalg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}	
C_{Ecoli}	LA1	S^{max}																					
		S^{min}																					
		\bar{S}																					
		S^{max}																					
		S^{min}																					
		\bar{S}																					
		S^{max}																					
		S^{min}																					
		\bar{S}																					
	CILF	S^{max}		0.018																			
		S^{min}																					
		\bar{S}		0.014																			
C_{fb}	LA1	S^{max}								0.012													
		S^{min}																					
		\bar{S}									0.010												
	LA2	S^{max}									0.012												
		S^{min}																					
		\bar{S}										0.010											
	CSLF	S^{max}									0.012												
		S^{min}																					
		\bar{S}										0.010											
	CILF	S^{max}									0.020												
		S^{min}																					
		\bar{S}										0.015											

ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																						
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdgl}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{dgl}	Y_{hb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{hb}	LA1	S^{max}	0.303		0.017	0.017								0.041	0.014	0.030		0.235	0.020	0.024		0.013
		S^{min}																0.022				
		\bar{S}	0.064															0.050				
		S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
		S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CSLF	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
	CILF	S^{max}																				
		S^{min}																				
		\bar{S}																				
C_{xi}	LA1	S^{max}	0.050		0.050																	
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.020		0.037																	
	LA2	S^{max}	0.042		0.049								0.014									
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.016		0.036																	
	CSLF	S^{max}	0.033		0.042								0.017									
		S^{min}																				
		\bar{S}	0.014		0.032																	
	CILF	S^{max}	0.019	0.014	0.026																	
		S^{min}																				
		\bar{S}		0.012	0.014																	

			ÍNDICES DE SENSIBILIDAD DE INTERACCIÓN																			
			θ	k_m	i_{nxs}	i_{nsf}	K_{NH4hb}	K_{NH4ab}	b_{ab}	b_{fb}	b_{asrb}	b_{amb}	i_{nsdkg}	b_{hb}	i_{nbm}	K_a	b_{alg}	Y_{fb}	K_{O2hb}	μ_{ab}	i_{nxi}	K_{O2ab}
C_{Xs}	LA1	S^{\max}	0.050		0.050																	
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.020		0.037																	
	LA2	S^{\max}	0.042		0.049								0.014									
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.016		0.036																	
	CSLF	S^{\max}	0.033		0.042								0.017									
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.014		0.032																	
	CILF	S^{\max}	0.022	0.024	0.031																	
		S^{\min}																				
		\bar{S}	0.012	0.019	0.020																	

ANEXO 2 - COMPARACIÓN MODELOS DE LAGUNAS DE ESTABILIZACIÓN

En este anexo se presenta una comparación del modelo de lagunas de estabilización empleado en el Capítulo 7 (Iturmendi, Estrada, Ochoa, Hoch, & Diaz, 2012), denominado *Modelo I*, y el del tipo ASM (Sah, Rousseau, Hooijmans, & Lens, 2011) presentando en el Capítulo 4, denominado *Modelo II*.

Tabla A.2.1. Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con el crecimiento de Fitoplancton

Fitoplancton I	Procesos			
	Crecimiento	Metabolismo Basal	Sedimentación	Pastoreo
BC : Cianobacteria	$\mu_{\max C} \cdot fT_C \cdot fI_C \cdot fN_C \cdot fpH_C \cdot BC$	Respiración y Muerte $-bm_C \cdot \theta_{bmC}^{(T-20)} \cdot BC$	$-(v_{sc}/D) \cdot BC$	$-pr_A \cdot BC$
BD: Diatomea	$\mu_{\max D} \cdot fT_D \cdot fI_D \cdot fN_D \cdot fpH_D \cdot BD$	$-bm_D \cdot \theta_{bmD}^{(T-20)} \cdot BD$	$-(v_{sD}/D) \cdot BD$	$-pr_A \cdot BD$
BG: Clorófita	$\mu_{\max G} \cdot fT_G \cdot fI_G \cdot fN_G \cdot fpH_G \cdot BG$	$-bm_G \cdot \theta_{bmG}^{(T-20)} \cdot BG$	$-(v_{sG}/D) \cdot BG$	$-pr_A \cdot BG$
Fitoplancton II	Crecimiento	Metabolismo Basal	Sedimentación	Pastoreo
X_{ALG} : Algas	$\mu_{ALG} \cdot fT \cdot fL \cdot (fN + fNO) \cdot X_{ALG}$	$b_{ALG} \cdot fT \cdot X_{ALG}$	-	-

Tabla A.2.2. Comparación *Modelos I y II* – Funciones de limitación del crecimiento de Fitoplancton.

Funciones de limitación					
Fitoplancton II	fT	fN	fI	fNO ₃	fpH
BC : Cianobacteria	$(T/T_C) \cdot e^{(1-(T/TC))}$	$fN_C = (P_{I_C} - P_{Cmin}) / (P_{Cmax} - P_{Cmin})$ Hamilton & Schladow (1997) $dP_{I_C}/dt = UP_{Cmax} \cdot (PO_4 / (PO_4 + Kp_C)) \cdot ((P_{Cmax} - P_{I_C}) / (P_{Cmax} - P_{Cmin})) - (L/L_C) \cdot e^{(1-(L/LC))}$ $Growth_C \cdot P_{I_C}$ $dNI_C/dt = UN_{Cmax} \cdot (NH_4 + NO_3) / (NH_4 + NO_3 + Kn_C) \cdot (N_{Cmax} - NI_C) / (N_{Cmax} - N_{Cmin}) - Growth_C \cdot NI_C$	$(L/L_C) \cdot e^{(1-(L/LC))}$	-	$fpH_C = Kph_C / (Kph_C + Yph_C)$ $Yph_C = 10^{(pH_{optC} - pH) - 1}$
BD: Diatomea	$(T/T_D) \cdot e^{(1-(T/TD))}$	$fN_D = (P_{I_D} - P_{Dmin}) / (P_{Dmax} - P_{Dmin})$ $dP_{I_D}/dt = UP_{Dmax} \cdot (PO_4 / (PO_4 + Kp_D)) \cdot ((P_{Dmax} - P_{I_D}) / (P_{Dmax} - P_{Dmin})) - Growth_D \cdot P_{I_D}$ $dNI_D/dt = UN_{Dmax} \cdot (NH_4 + NO_3) / (NH_4 + NO_3 + Kn_D) \cdot (N_{Dmax} - NI_D) / (N_{Dmax} - N_{Dmin}) - Growth_D \cdot NI_D$	$(L/L_D) \cdot e^{(1-(L/LD))}$	-	$fpH_D = Kph_D / (Kph_D + Yph_D)$ $Yph_D = 10^{(pH_{optD} - pH) - 1}$
BG: Clorófita	$(T/T_G) \cdot e^{(1-(T/TG))}$	$fN_G = (P_{I_G} - P_{Gmin}) / (P_{Gmax} - P_{Gmin})$ $dP_{I_G}/dt = UP_{Gmax} \cdot (PO_4 / (PO_4 + Kp_G)) \cdot ((P_{Gmax} - P_{I_G}) / (P_{Gmax} - P_{Gmin})) - Growth_G \cdot P_{I_G}$ $dNI_G/dt = UN_{Gmax} \cdot (NH_4 + NO_3) / (NH_4 + NO_3 + Kn_G) \cdot (N_{Gmax} - NI_G) / (N_{Gmax} - N_{Gmin}) - Growth_G \cdot NI_G$	$(L/L_G) \cdot e^{(1-(L/LG))}$	-	$fpH_G = Kph_G / (Kph_G + Yph_G)$ $Yph_G = 10^{(pH_{optG} - pH) - 1}$
Fitoplancton II	fT	fN	fI	fNO ₃	fpH
X _{ALG} : Algas	$\theta \cdot (T-20)$	$S_{NH4} / (K_{NH4ALG} + S_{NH4})$	$fL = Iz / (kI + Iz)$ $Iz = I_0 \cdot e^{(-k \cdot z)}$ $z = \text{profundidad}$	$S_{NO3} / (K_{NO3ALG} + S_{NO3})$	-

T: temperatura (tipo Arrhenius), N: amonio (tipo Monod), I: radiación solar (II-Ley de Lambert Beer), NO₃: nitratos,

Tabla A.2.3. Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con los distintos tipos de Bacteria.

Bacteria I	Procesos			
	Crecimiento	Metabolismo Basal	Sedimentación	Pastoreo
BB: Heterotrófica	$\mu_{\max B} \cdot fDBO_B \cdot fO2_B \cdot fpH_B \cdot fT_B \cdot fN_B \cdot BB$	$-bm_B \cdot \theta_{bmB}^{(T-20)} \cdot BB$	$-vs_B/D \cdot BB$	$-pr_B \cdot BB$
Bacteria II	Crecimiento	Metabolismo Basal	Sedimentación	Pastoreo
X _H : Heterotrófica	Condiciones aeróbicas y anóxicas $\mu_H \cdot fT \cdot fOM \cdot fO_2 \cdot fN \cdot X_H + \eta_H \cdot \mu_H \cdot fT \cdot fOM \cdot fO_2 \cdot fNO \cdot fN \cdot X_H - b_H \cdot fT \cdot X_H$		-	-
X _A : Autotrófica	$\mu_A \cdot fT \cdot fN \cdot fO_2 \cdot X_A$	$-b_A \cdot fT \cdot X_A$	-	-
X _{FB} : Fermentadora	$\mu_{FB} \cdot fT \cdot fN \cdot fOM \cdot fO_2 \cdot fNO \cdot X_{FB}$	$-b_{FB} \cdot fT \cdot X_{FB}$	-	-
X _{ASRB} : Acetotrófica Sulfato Reductora	$\mu_{ASRB} \cdot fT \cdot fN \cdot fOM \cdot fO_2 \cdot fNO \cdot fSO_4 \cdot X_{ASRB}$	$-b_{ASRB} \cdot fT \cdot X_{ASRB}$	-	-
X _{AMB} : Acetotrófica Metanogénica	$\mu_{AMB} \cdot fT \cdot fN \cdot fOM \cdot fO_2 \cdot fNO \cdot X_{AMB}$	$-b_{AMB} \cdot fT \cdot X_{AMB}$	-	-

Tabla A.2.4. Comparación *Modelos I y II* – Funciones de limitación del crecimiento de los distintos tipos de Bacteria.

Bacteria I	Funciones de limitación						
	fT	fN	fMO	fO ₂	fNO ₃	f _{pH}	fSO ₄
BB: Heterotrófica	$(T/T_B) \cdot e^{1-(T/T_B)}$	$\text{Min}[(\text{NH}_4 + \text{NO}_3)/(\text{NH}_4 + \text{NO}_3 + \text{K}_{\text{NB}}), \text{PO}_4/(\text{PO}_4 + \text{K}_{\text{PB}})]$	$\text{DBO}/(\text{K}_{\text{dbO}_B} + \text{DBO})$	$\text{OD}/(\text{K}_{\text{O}_2B} + \text{OD})$	$\text{NO}_3/(\text{K}_{\text{DN}_B} + \text{NO}_3)^*$	$\text{f}_{\text{pHB}} = \text{K}_{\text{pHB}}/(\text{K}_{\text{pHB}} + \text{Y}_{\text{pHB}})$ $\text{Y}_{\text{pHB}} = 10^{(p_{\text{HoptB}} - \text{pH}) - 1}$	-
Bacteria II	fT	fN	fMO	fO ₂	fNO ₃	f _{pH}	fSO ₄
X _H : Heterotrófica	$\theta \cdot (T-20)$	$\text{S}_{\text{NH}_4}/(\text{K}_{\text{NH}_4\text{H}} + \text{S}_{\text{NH}_4})$	$[\text{S}_A/(\text{K}_{\text{SAH}} + \text{S}_A) \cdot \text{S}_A/(\text{S}_A + \text{S}_F)] + [\text{S}_F/(\text{K}_{\text{SFH}} + \text{S}_F) \cdot \text{S}_F/(\text{S}_F + \text{S}_A)]$	$\text{S}_0/(\text{K}_{\text{OH}} + \text{S}_0)^{**}$ $\text{K}_{\text{OH}}/(\text{K}_{\text{OH}} + \text{S}_0)^*$	$\text{S}_{\text{NO}_3}/(\text{K}_{\text{NO}_3\text{H}} + \text{S}_{\text{NO}_3})^*$	-	-
X _A : Autotrófica	$\theta \cdot (T-20)$	$\text{S}_{\text{NH}_4}/(\text{K}_{\text{NH}_4\text{A}} + \text{S}_{\text{NH}_4})$	-	$\text{S}_0/(\text{K}_{\text{OA}} + \text{S}_0)$	-	-	-
X _{FB} : Fermentadora	$\theta \cdot (T-20)$	$\text{S}_{\text{NH}_4}/(\text{K}_{\text{NH}_4\text{FB}} + \text{S}_{\text{NH}_4})$	$\text{S}_F/(\text{K}_{\text{SFFB}} + \text{S}_F)$	$\text{K}_{\text{OFB}}/(\text{K}_{\text{OFB}} + \text{S}_0)$	$\text{K}_{\text{NO}_3\text{FB}}/(\text{K}_{\text{NO}_3\text{FB}} + \text{S}_{\text{NO}_3})$	-	-
X _{ASRB} : Acetotrófica Sulfato Reductora	$\theta \cdot (T-20)$	$\text{S}_{\text{NH}_4}/(\text{K}_{\text{NH}_4\text{ASRB}} + \text{S}_{\text{NH}_4})$	$\text{S}_A/(\text{K}_{\text{SAASRB}} + \text{S}_A)$	$\text{K}_{\text{OASRB}}/(\text{K}_{\text{OASRB}} + \text{S}_0)$	$\text{K}_{\text{NO}_3\text{ASRB}}/(\text{K}_{\text{NO}_3\text{ASRB}} + \text{S}_{\text{NO}_3})$	-	$\text{S}_{\text{SO}_4}/(\text{K}_{\text{SO}_4\text{ASRB}} + \text{S}_{\text{SO}_4})$
X _{AMB} : Acetotrófica Metanogénica	$\theta \cdot (T-20)$	$\text{S}_{\text{NH}_4}/(\text{K}_{\text{NH}_4\text{AMB}} + \text{S}_{\text{NH}_4})$	$\text{S}_A/(\text{K}_{\text{SAAMB}} + \text{S}_A)$	$\text{K}_{\text{OAMB}}/(\text{K}_{\text{OAMB}} + \text{S}_0)$	$\text{K}_{\text{NO}_3\text{AMB}}/(\text{K}_{\text{NO}_3\text{AMB}} + \text{S}_{\text{NO}_3})$	-	-

T: temperatura (tipo Arrhenius), N: amonio (I- Ley del mínimo de Liebig, II -tipo Monod), MO: materia orgánica, O₂: oxígeno disuelto, NO₃: nitratos, SO₄: sulfato.

*) Capa inferior de la laguna facultativa/condiciones anóxicas

**) Condiciones aeróbicas

Tabla A.2.5. Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con los distintos tipos de Materia Orgánica.

Materia Orgánica I	Procesos					
	Captación Bacteria	Muerte Fitoplancton	Muerte Bacteria	Oxidación Materia Orgánica	Sedimentación Sedimento	Hidrólisis
DBO: Demanda Bioquímica de Oxígeno	$-R_{Bgorwth} \cdot Y_{OCB}$	$(R_{Cmetab} + R_{Dmetab} + R_{Gmetab}) \cdot Y_{OCA}$	$R_{Bmetab} \cdot Y_{OCB}$	$-k_{db} \cdot \theta_{dbo}^{(T-20)} \cdot OD / (K_{dbo} + OD) \cdot DBO$	$-v_{SDBO} \cdot (1 - f_{DDBO}) / D \cdot DBO$	$K_{anae} \cdot f_{DDBO}$
Materia Orgánica II DQO = $X_S + X_I + S_A + S_I + S_F$	Captación Bacteria	Muerte Fitoplancton	Muerte Bacteria	Oxidación materia orgánica	Sedimentación Sedimento	Hidrólisis
X_S : Sustrato particulado lentamente biodegradable	-	$(1 - f_{p1}) \cdot Decay_{ALG}$	$(1 - f_{p2}) \cdot Decay_H$ $+(1 - f_{p2}) \cdot Decay_A$ $+(1 - f_{p2}) \cdot Decay_{FB}$ $+(1 - f_{p2}) \cdot Decay_{ASRB}$ $+(1 - f_{p2}) \cdot Decay_{AMB}$	-	-	-Hidrólisis
X_I : Materia orgánica particulada inerte	-	$f_{p1} \cdot Decay_{ALG}$	$f_{p2} \cdot Decay_{HB}$ $+f_{p2} \cdot Decay_{AB}$ $+f_{p2} \cdot Decay_{FB}$ $+f_{p2} \cdot Decay_{ASRB}$ $+f_{p2} \cdot Decay_{AMB}$	-	-	-
S_A : Productos de la fermentación	$-1/Y_H \cdot Growth_{H/SA}$ $+(1 - Y_{FB}) / Y_{FB} \cdot Growth_{FB/SA}$ $-1/Y_{ASRB} \cdot Growth_{ASRB/SA}$ $-1/Y_{AMB} \cdot Growth_{AMB/SA}$	-	-	-	-	-
S_I : Materia orgánica soluble inerte	-	-	-	-	-	$-f_{si} \cdot$ Hidrólisis
S_F : Sustrato orgánico soluble de fácil y rápida biodegradación	$-1/Y_H \cdot Growth_{H/SF}$ $-1/Y_{FB} \cdot Growth_{FB/SF}$	-	-	-	-	$(1 - f_{si}) \cdot$ Hidrólisis

Tabla A.2.6. Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con el Oxígeno Disuelto.

Oxígeno	Procesos					
	Fotosíntesis y Metabolismo Algal	Respiración Bacteriana	Nitrificación	Oxidación Materia Orgánica	Mineralización	Aireación
Oxígeno I	$[(1.3-0.3 \cdot \text{PNH}_{4C}) \cdot \text{Rgrowth}_C + (1.3-0.3 \cdot \text{PNH}_{4D}) \cdot \text{Rgrowth}_D + (1.3-0.3 \cdot \text{PNH}_{4G}) \cdot \text{Rgrowth}_G - (\text{Rmetab}_C + \text{Rmetab}_D + \text{Rmetab}_G)] \cdot \text{YocA};$	$-\text{Rmetab}_B \cdot \text{YocB}$	$-k_{ni} \cdot \theta_{ni}^{(\text{Temp}-20)} \cdot \text{OD} / (K_{nit} + \text{OD}) \cdot \text{NH}_4 \cdot \text{Yon}$	$-k_{db} \cdot \theta_{dbo}^{(\text{Temp}-20)} \cdot \text{OD} / (K_{dbo} + \text{OD}) \cdot \text{DBO}$	$-[\text{k}_{mn} \cdot \theta_{mn}^{(\text{Temp}-20)} \cdot (\text{BC} + \text{BD} + \text{BG} + \text{BB}) / (\text{K}_{mpc} + (\text{BC} + \text{BD} + \text{BG} + \text{BB})) \cdot \text{NO}] \cdot \text{Yon}$ $-[\text{k}_{mp} \cdot \theta_{mp}^{(\text{Temp}-20)} \cdot (\text{BC} + \text{BD} + \text{BG} + \text{BB}) / (\text{K}_{mpc} + (\text{BC} + \text{BD} + \text{BG} + \text{BB})) \cdot \text{PO}] \cdot \text{Yop}$	Mecánica: $\text{cot} \cdot \text{P}_{\text{mot}} / \text{V}$ Natural: $\text{K}_a \cdot (\text{C}_s - \text{DO}) / \text{h}$
Oxígeno II	Fotosíntesis y Metabolismo Algal	Respiración Bacteriana	Nitrificación	Oxidación Materia Orgánica	Mineralización	Re-Aireación Superficial
S_0 : Oxígeno Disuelto	$\text{Growth}_{\text{ALG}/\text{NH}_4} + (1 + 4,57 \cdot \text{inx}_{\text{ALG}}) \cdot \text{Growth}_{\text{ALG}/\text{NO}}$	$(1 - 1/\text{Y}_H) \cdot \text{Growth}_H + (1 - 4,75/\text{Y}_A) \cdot \text{Growth}_A$	-	-	-	$\text{K}_a \cdot (\text{C}_s - \text{S}_0) / \text{d}$

Tabla A.2.7. Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con los distintos tipos de Nutrientes.

Nutriente	Procesos							
	Crecimiento	Metabolismo		Mineralización	Sedimentación	Sedimento	Nitrificación	Desnitrificación
I	Captación Bacteria y Fitoplancton	Muerte Fitoplancton	Muerte Bacteria					
NO: Nitrógeno Orgánico	$-(R_{growth_B} \cdot NO \cdot NC_B) / (K_{NB} + NO) -$	$fON \cdot (NI_C \cdot R_{metab_C} + NI_D \cdot R_{metab_D} + NI_G \cdot R_{metab_G})$	$fON \cdot NC_B \cdot R_{metab_B}$	$-k_{mn} \cdot \theta_{mn}^{(T-20)} \cdot (BC+BD+BG+BB) / (K_{mpc} + BC+BD+BG+BB) \cdot NO$	$-v_{SNO} \cdot (1 - f_{DNO}) / D \cdot NO$	$S_{NO} \cdot A / VL$	-	-
NO ₃ : Nitrato	$-(1 - PNH_{4B}) \cdot (R_{growth_B} \cdot NO_3 \cdot NC_B) / (K_{NB} + NO_3) - \sum (1 - PNH_{4i}) \cdot UN_{i_{max}} \cdot (NH_4 + NO_3) / (NH_4 + NO_3 + K_{ni}) \cdot ((N_{i_{max}} - NI_i) / (N_{i_{max}} - N_{i_{min}})) \cdot B_i$	-	-	-	-	-	$k_{ni} \cdot \theta_{ni}^{(T-20)} \cdot OD / (K_{nit} + OD) \cdot NH_4$	$-k_{dn} \cdot \theta_{dn}^{(T-20)} \cdot (1 - OD / (K_{den} + OD)) \cdot NO_3$
NH ₄ : Amonio	$-PNH_{4B} \cdot (R_{growth_B} \cdot NH_4 \cdot NC_B) / (K_{NB} + NH_4) - \sum (PNH_{4i}) \cdot UN_{i_{max}} \cdot (NH_4 + NO_3) / (NH_4 + NO_3 + K_{ni}) \cdot ((N_{i_{max}} - NI_i) / (N_{i_{max}} - N_{i_{min}})) \cdot B_i$	$(1 - fON) \cdot (NI_C \cdot R_{metab_C} + NI_D \cdot R_{metab_D} + NI_G \cdot R_{metab_G})$	$(1 - fON) \cdot NC_B \cdot R_{metab_B}$	$k_{mn} \cdot \theta_{mn}^{(T-20)} \cdot (BC+BD+BG+BB) / (K_{mpc} + BC+BD+BG+BB) \cdot NO$	-	$S_N \cdot (1 - OD / (K_{DOS} + OD)) / D$	$-k_{ni} \cdot \theta_{ni}^{(T-20)} \cdot OD / (K_{nit} + OD) \cdot NH_4$	
PO: Fósforo Orgánico	$-(R_{growth_B} \cdot PO \cdot PC_B) / (K_{PB} + PO)$	$fOP \cdot (PI_C \cdot R_{metab_C} + PI_D \cdot R_{metab_D} + PI_G \cdot R_{metab_G})$	$fOP \cdot PC_B \cdot R_{metab_B}$	$-k_{mp} \cdot \theta_{mp}^{(T-20)} \cdot (BC+BD+BG+BB) / (K_{mpc} + BC+BD+BG+BB) \cdot PO$	$-v_{SPO} \cdot (1 - f_{DPO}) / D \cdot PO$	-	-	-
PO ₄ : Fosfato	$-(R_{growth_B} \cdot PO_4 \cdot PC_B) / (K_{PB} + PO_4) - \sum UP_{i_{max}} \cdot PO_4 / (PO_4 + K_{pi}) \cdot ((P_{i_{max}} - PI_i) / (P_{i_{max}} - P_{i_{min}})) \cdot B_i$	$(1 - fOP) \cdot (PI_C \cdot R_{metab_C} + PI_D \cdot R_{metab_D} + PI_G \cdot R_{metab_G})$	$(1 - fOP) \cdot PC_B \cdot R_{metab_B}$	$k_{mp} \cdot \theta_{mp}^{(T-20)} \cdot (BC+BD+BG+BB) / (K_{mpc} + BC+BD+BG+BB) \cdot PO$	-	$S_{PO} \cdot (1 - OD / (K_{DOS} + OD)) / D$	-	-

i=C (Cianobacteria), D (Diatomea), G (Clorófita)

Tabla A.2.7(cont). Comparación *Modelos I y II* – Procesos relacionados con los distintos tipos de Nutrientes.

Nutriente	Procesos				
	Crecimiento	Metabolismo			Hidrólisis
II	Captación Fitoplancton	Captación Bacteria	Muerte Fitoplancton	Muerte Bacteria	
S_{NH4} : Amonio	$-i_{NXALG} \cdot Growth_{ALG/NH4}$	$-i_{NBM} \cdot Growth_{H/SA}$ $-(i_{NBM} \cdot i_{NSF}/Y_H) \cdot Growth_{H/SF}$ $-(i_{NBM} + 1/Y_A) \cdot Growth_A$ $-(i_{NBM} \cdot i_{NSF}/Y_{FB}) \cdot Growth_{FB}$ $-i_{NBM} \cdot Growth_{ASRB}$ $-i_{NBM} \cdot Growth_{AMB}$	$[(f_{p1}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NXALG} - (f_{p1} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_{ALG}$	$[(f_{p2}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_H$ $+ [(f_{p2}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_A$ $+ [(f_{p2}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_{FB}$ $+ [(f_{p2}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_{ASRB}$ $+ [(f_{p2}-1) \cdot i_{NXS} + i_{NBM} - (f_{p2} \cdot i_{NXI})] \cdot Decay_{AMB}$	$[i_{NXS} \cdot f_{SI} \cdot i_{NSI} - (1 - f_{SI}) \cdot i_{NSF}] \cdot Hidrólisis$
S_{NO3} : Nitrato	$-i_{NXALG} \cdot Growth_{ALG/NO3}$	$-(1 - Y_H)/(2.86 \cdot Y_H) \cdot Growth_H$ $+ 1/Y_A \cdot Growth_A$	-	-	-
S_{SO4} : Sulfato	-	$-(1 - Y_{ASRB})/(2 \cdot Y_{ASRB}) \cdot Growth_{ASRB}$	-	-	-